



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



Αθανάσιος Τσακνάκης

Αριθμητικές Μέθοδοι για την Επίλυση Χαμιλτονιανών
Συστημάτων

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Ιωάννινα, 2025



UNIVERSITY OF IOANNINA
Department of Mathematics



Athanasios Tsaknakis

Numerical Methods for Solving Hamiltonian Systems

Master's Thesis

Ioannina, 2025

*Στους γονείς μου Δημήτρη και Δήμητρα
και στην αδερφή μου Ασημίνα.*

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στην Αριθμητική Ανάλυση που απονέμει το Τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε τη 14/05/2025 από την εξεταστική επιτροπή:

Ονοματεπώνυμο	Βαθμίδα
---------------	---------

Φωτεινή Καρακατσάνη	Επίκουρη Καθηγήτρια
---------------------	---------------------

Μιχαήλ Ξένος	Καθηγητής
--------------	-----------

Θεόδωρος Χωρίκης	Καθηγητής
------------------	-----------

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

“Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή.”

Αθανάσιος Τσακνάκης

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η παρούσα μεταπτυχιακή διατριβή εκπονήθηκε στο τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, στα πλαίσια των μεταπτυχιακών σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος στην κατεύθυνση της Αριθμητικής Ανάλυσης.

Η μεταπτυχιακή αυτή εργασία πραγματοποιήθηκε υπό την επίβλεψη τριμελούς επιτροπής, με επιβλέπουσα καθηγήτρια την κ. Φωτεινή Καρακατσάνη και μέλη τον κ. Μιχαήλ Ξένο και τον κ. Θεόδωρο Χωρίκη.

Ευχαριστώ πολύ, την επιβλέπουσα καθηγήτρια μου κ. Φωτεινή Καρακατσάνη του τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων για την καθοδήγηση της αυτό το χρόνο της εκπόνησης της μεταπτυχιακής διατριβής. Ήταν τιμή μου να συνεργαστώ μαζί της, διότι είναι μία ακαδημαϊκός με άριστη επιστημονική κατάρτηση, και οι συμβουλές της καθώς και η βοήθειά της ήταν σημαντικές για να ολοκληρωθεί αυτή η δύσκολη προσπάθεια.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της μεταπτυχιακής διατριβής είναι η μελέτη και η εφαρμογή αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση Χαμιλτονιανών συστημάτων, με έμφαση στις συμπλεκτικές μεθόδους. Οι συμπλεκτικές μέθοδοι είναι ιδιαίτερα σημαντικές για την αξιόπιστη προσομοίωση Χαμιλτονιανών και “σχεδόν” Χαμιλτονιανών συστημάτων σε μεγάλα διαστήματα χρόνου, αφού η προσεγγιστική λύση που υπολογίζουν διατηρεί τα ποιοτικά και γεωμετρικά χαρακτηριστικά της ακριβούς λύσης.

Στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής ορίζονται βασικές έννοιες του λογισμού μεταβολών και οι εξισώσεις Euler–Lagrange, με ιδιαίτερη έμφαση στις εφαρμογές τους στη δυναμική μηχανικών συστημάτων. Αναλύονται οι εξισώσεις Hamilton, η έννοια της Χαμιλτονιανής ως ολικής ενέργειας, και η ροή των Χαμιλτονιανών συστημάτων, τα οποία χαρακτηρίζονται από τη διατήρηση της ενέργειας και του όγκου στον χώρο φάσης. Η συμπλεκτικότητα της ροής αποδεικνύεται μέσω του θεωρήματος του Poincaré.

Στο πρώτο μέρος του δεύτερου κεφαλαίου ορίζεται και εξετάζεται η συμπλεκτικότητα αριθμητικών μεθόδων μέσω αριθμητικών ολοκληρωτών. Αποδεικνύεται η συμπλεκτικότητα των συμπλεκτικών μεθόδων του Euler και της πεπλεγμένης μεθόδου του μέσου. Επιπλέον, η συμπλεκτικότητα διασφαλίζεται στις μεθόδους Störmer–Verlet μέσω συνθέσεων συμπλεκτικών αριθμητικών ολοκληρωτών.

Στο δεύτερο μέρος, θεωρούμε τις κλασικές μεθόδους των Runge–Kutta και μία ειδική κατηγορία αυτών, τις λεγόμενες διαμερισμένες μεθόδους των Runge–Kutta. Δίνουμε ικανή συνθήκη για να είναι οι κλασικές και οι διαμερισμένες μέθοδοι των Runge–Kutta συμπλεκτικές. Οι συνθήκες αυτές είναι και αναγκαίες για σχεδόν όλες τις μεθόδους. Ως παράδειγμα, θεωρούμε τις κλασικές μεθόδους του πρώτου μέρους του δεύτερου κεφαλαίου, καθώς και τη μέθοδο των Gauss–Legendre, η οποία είναι μία διβηματική μέθοδος των Runge–Kutta με τάξη σύγκλισης τέσσερα.

Στο τρίτο κεφάλαιο εφαρμόζονται οι συμπλεκτικές μέθοδοι για την επίλυση Χαμιλτονιανών συστημάτων σε μεγάλα χρονικά διαστήματα, με έμφαση στη διατήρηση ποσοτήτων όπως η ενέργεια του συστήματος. Τα αριθμητικά πειράματα

δείχνουν ότι οι συμπλεκτικές μέθοδοι είναι κατάλληλες για την αριθμητική επίλυση Χαμιλτονιανών συστημάτων, αφού οι αριθμητικές προσεγγίσεις που υπολογίζουν διαθέτουν τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της ακριβούς λύσης και αυτό έχει σαν αποτέλεσμα το συνολικό σφάλμα στις διατηρητέες ποσότητες να παραμένει μικρό. Επιπλέον, η γεωμετρική ευστάθειά τους εξασφαλίζει ότι το σφάλμα της Χαμιλτονιανής δε συσσωρεύεται με την πάροδο του χρόνου αλλά παραμένει ψευδοπεριοδικό. Συνεπώς, τα αποτελέσματα που παράγονται από τις συμπλεκτικές αριθμητικές μεθόδους είναι αξιόπιστα για την επίλυση Χαμιλτονιανών συστημάτων σε μεγάλα χρονικά διαστήματα.

Τέλος, στο παράρτημα παρουσιάζονται οι κώδικες που έχουν υλοποιηθεί στη γλώσσα προγραμματισμού Python.

ABSTRACT

The aim of this M.Sc. thesis is to study and apply numerical methods for solving Hamiltonian systems, with an emphasis on symplectic methods. Symplectic methods are particularly important for the reliable simulation of Hamiltonian and “almost” Hamiltonian systems over long time intervals, since the approximate solutions they compute preserve the qualitative and geometric properties of the exact solutions.

In the first chapter of this thesis, the basic concepts of the calculus of variations and the Euler–Lagrange equations are introduced, with particular emphasis on their applications to the dynamics of mechanical systems. Hamilton’s equations are analyzed, along with the concept of the Hamiltonian as the total energy and the flow of Hamiltonian systems, which are characterized by the conservation of energy and volume in phase space. The symplecticity of the flow is proven through Poincaré’s theorem.

In the first part of the second chapter, the symplecticity of numerical methods is defined and examined through numerical integrators. The symplecticity of the symplectic Euler methods and the implicit midpoint method is proven. Furthermore, symplecticity is ensured in the Störmer–Verlet methods through the composition of numerical symplectic integrators.

In the second part, classical Runge–Kutta methods and a special category thereof, the so-called partitioned Runge–Kutta methods, are considered. A sufficient condition is provided for the classical and partitioned Runge–Kutta methods to be symplectic. These conditions are also necessary for almost all methods. As an example, the classical methods from the first part of the second chapter are examined, as well as the Gauss–Legendre method, which is a two-stage Runge–Kutta method with fourth-order convergence.

In the third chapter, symplectic methods are applied to solving Hamiltonian systems over long time intervals, with an emphasis on preserving quantities such as the system’s energy. Numerical experiments show that symplectic methods are suitable for the numerical solution of Hamiltonian systems, as the

numerical approximations they compute possess the qualitative characteristics of the exact solution, resulting in the overall error in conserved quantities remaining small. Furthermore, their geometric stability ensures that the Hamiltonian error does not accumulate over time but remains pseudoperiodic. Therefore, results produced by symplectic numerical methods are reliable for solving Hamiltonian systems over long time intervals.

Finally, the appendix presents the code implemented in the Python programming language.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1	Χαμιλτονιανή Δυναμική	2
1.1	Λογισμός Μεταβολών	2
1.2	Χαμιλτονιανά Συστήματα	13
1.2.1	Ιδιότητες Χαμιλτονιανών Συστημάτων	16
2	Συμπλεκτικές Αριθμητικές Μέθοδοι	19
2.1	Συμπλεκτικές Μέθοδοι του Euler	22
2.2	Μέθοδοι των Störmer–Verlet	25
2.3	Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου	28
2.4	Αριθμητικές Μέθοδοι των Runge–Kutta	30
2.4.1	Συμπλεκτικές μέθοδοι των Runge–Kutta	32
2.4.2	Συμπλεκτικές Διαμερισμένες Runge–Kutta (SPRK)	35
3	Εφαρμογές Μεθόδων των Runge–Kutta και των Διαμερισμένων Runge–Kutta σε Χαμιλτονιανά Προβλήματα	42
3.1	Εκκρεμές	42
3.1.1	Εφαρμογή Αριθμητικών Μεθόδων	45
3.2	Θηρευτής-Θήραμα	52
3.2.1	Εφαρμογή Αριθμητικών Μεθόδων	57
3.3	Πρόβλημα Kepler Δύο Σωμάτων	63
3.3.1	Εφαρμογή Αριθμητικών Συμπλεκτικών Μεθόδων	65
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	82

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΧΑΜΙΛΤΟΝΙΑΝΗ ΔΥΝΑΜΙΚΗ

1.1 Λογισμός Μεταβολών

Η μελέτη δυναμικών συστημάτων που διέπονται από τη Χαμιλτονιανή διατύπωση της κλασικής μηχανικής αποτελεί βασικό αντικείμενο της θεωρητικής και εφαρμοσμένης φυσικής, καθώς και της αριθμητικής ανάλυσης. Τα Χαμιλτονιανά συστήματα περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη φυσικών φαινομένων, διατηρώντας θεμελιώδεις φυσικές ποσότητες, όπως η Χαμιλτονιανή και η δομή του χώρου φάσης. Ωστόσο, στις περισσότερες περιπτώσεις η ακριβής λύση των εξισώσεων κίνησης είναι αδύνατη, και γι' αυτό απαιτείται η χρήση αριθμητικών μεθόδων. Η ανάγκη για αξιόπιστες προσεγγίσεις σε μεγάλα χρονικά διαστήματα οδήγησε στην ανάπτυξη των συμπλεκτικών αριθμητικών μεθόδων, οι οποίες διαθέτουν την κρίσιμη ιδιότητα να διατηρούν τη γεωμετρική δομή του αρχικού συστήματος. Οι συμπλεκτικές μέθοδοι είναι ιδιαίτερα κατάλληλες για την επίλυση Χαμιλτονιανών συστημάτων, καθώς εξασφαλίζουν τη διατήρηση διατηρητέων ποσοτήτων, περιορίζουν τη συσσώρευση αριθμητικού σφάλματος και προσφέρουν γεωμετρική ευστάθεια και ακρίβεια σε προσομοιώσεις που καλύπτουν μεγάλα χρονικά διαστήματα. Η παρούσα εργασία επικεντρώνεται στη θεωρητική κατανόηση και στην αριθμητική εφαρμογή αυτών των μεθόδων, αξιολογώντας τη συμπεριφορά τους μέσα από χαρακτηριστικά παραδείγματα και αριθμητικά πειράματα.

Ο λογισμός μεταβολών αποτελεί θεμελιώδες εργαλείο για την κατανόηση και την ανάλυση συστημάτων που περιλαμβάνουν ολοκληρώματα, καθώς και για την εύρεση των συνθηκών βελτιστοποίησης αυτών των ολοκληρωμάτων. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό των συνθηκών υπό τις οποίες οι συναρτήσεις ελαχιστοποιούν ή μεγιστοποιούν τα αντίστοιχα ολοκληρώματα, κάτι που αποτελεί βασικό πρόβλημα στην αναλυτική μηχανική και τη θεωρία των δυναμικών συστημάτων. Μέσω του λογισμού μεταβολών μπορούμε να εξάγουμε σημαντικές εξισώσεις, όπως οι εξισώσεις Euler-Lagrange, οι οποίες περιγράφουν τις κινήσεις των συστημάτων. Με τη βοήθεια αυτών των εξισώσεων είναι επι-

κτό να αποδείξουμε στη συνέχεια τις εξισώσεις κίνησης Hamilton που διέπουν τη δυναμική των Χαμιλτονιανών συστημάτων. Επιπλέον, μέσω του λογισμού μεταβολών αποδεικνύεται ότι η Χαμιλτονιανή, η οποία εκφράζει την ενέργεια ενός Χαμιλτονιανού συστήματος, ισούται με το άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας του συστήματος.

Το κεντρικό πρόβλημα στον λογισμό μεταβολών, όπως αναλύεται στο βιβλίο [6], συνίσταται στον προσδιορισμό της μοναδικής συνάρτησης $y(x)$, για την οποία το ολοκλήρωμα

$$J[z] = \int_{x_1}^{x_2} f(z(x), z'(x), x) dx, \quad (1.1)$$

$x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, λαμβάνει τοπικό ακρότατο. Έστω ότι το συναρτησιακό J παρουσιάζει τοπικό ακρότατο για $z = y$. Για κάθε $a \in \mathbb{R}$, θεωρούμε τις μεταβολές της y , ορισμένες από τη σχέση

$$\widehat{y}(a, x) = y(x) + ag(x), \quad (1.2)$$

όπου $g(x)$ είναι αυθαίρετη συνάρτηση με συνεχή πρώτη παράγωγο στο διάστημα $[x_1, x_2]$ και ικανοποιεί τις οριακές συνθήκες $g(x_1) = g(x_2) = 0$.

Αντικαθιστώντας στη σχέση (1.1) τη z με $\widehat{y}$, ορίζουμε τη συνάρτηση

$$G(a) = \int_{x_1}^{x_2} f(\widehat{y}(a, x), \widehat{y}_x(a, x), x) dx, \quad (1.3)$$

η οποία ικανοποιεί προφανώς τη σχέση $G(0) = J[y]$. Για να παρουσιάζει το συναρτησιακό $J[y]$ τοπικό ακρότατο στη συνάρτηση $z = y$, η αναγκαία συνθήκη είναι $G'(0) = 0$.

Αλλά ισχύει

$$\begin{aligned} G'(a) &= \frac{d}{da} \left(\int_{x_1}^{x_2} f(\widehat{y}(a, x), \widehat{y}_x(a, x), x) dx \right) \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial \widehat{y}} \frac{\partial \widehat{y}}{\partial a} + \frac{\partial f}{\partial \widehat{y}_x} \frac{\partial \widehat{y}_x}{\partial a} \right) dx. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Η αλλαγή της ολοκλήρωσης με την παραγωγή στη παραπάνω σχέση προκύπτει κάνοντας την υπόθεση ότι $f \in C^1(\mathbb{R}^2 \times [x_1, x_2])$. Μέσω της εξίσωσης (1.2), έχουμε

$$\frac{\partial \widehat{y}}{\partial a} = g(x), \quad \frac{\partial \widehat{y}_x}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{\partial \widehat{y}}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial a} (y'(x) + ag'(x)) = g'(x), \quad (1.5)$$

σύμφωνα με την οποία η σχέση (1.4) αναδιατυπώνεται, ως

$$G'(a) = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial \widehat{y}} g(x) + \frac{\partial f}{\partial \widehat{y}_x} \frac{dg}{dx} \right) dx. \quad (1.6)$$

Για $a = 0$, λαμβάνουμε

$$G'(0) = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial y} g(x) + \frac{\partial f}{\partial y'} \frac{dg}{dx} \right) dx, \quad (1.7)$$

από την οποία, χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση κατά παράγοντες στο δεύτερο όρο του ολοκληρώματος στα δεξιά, εξάγουμε

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial f}{\partial y'} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\partial f}{\partial y'} g(x) \Big|_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) g(x) dx. \quad (1.8)$$

Αφού $g(x_1) = g(x_2) = 0$, η εξίσωση (1.7), γίνεται

$$\begin{aligned} G'(0) &= \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial f}{\partial y} g(x) - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) g(x) \right] dx \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right) g(x) dx. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Τώρα, η συνθήκη $G'(0) = 0$, σύμφωνα με τη σχέση (1.9), συνεπάγεται ότι

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0, \quad (1.10)$$

η οποία αναφέρεται ως **Εξίσωση του Euler**.

Θα μελετήσουμε στη συνέχεια μία άλλη μορφή της εξίσωσης του Euler, στην ειδική περίπτωση που

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0. \quad (1.11)$$

Αρχικά έχουμε

$$\frac{d}{dx} f(x, y, y') = \frac{\partial f}{\partial y} y' + \frac{\partial f}{\partial y'} y'' + \frac{\partial f}{\partial x}, \quad (1.12)$$

και

$$\frac{d}{dx} \left(y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = y'' \frac{\partial f}{\partial y'} + y' \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'}. \quad (1.13)$$

Αντικαθιστώντας στην τελευταία σχέση το $y'' \frac{\partial f}{\partial y'}$ από την εξίσωση (1.12), λαμβάνουμε

$$\frac{d}{dx} \left(y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = \frac{df}{dx} - \frac{\partial f}{\partial x} - y' \frac{\partial f}{\partial y} + y' \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'}, \quad (1.14)$$

και χρησιμοποιώντας την εξίσωση του Euler (1.10), καταλήγουμε

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{d}{dx} \left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0. \quad (1.15)$$

Αυτή η εξίσωση αναφέρεται ως **δεύτερη μορφή της εξίσωσης του Euler**. Στην ειδική περίπτωση κατά την οποία η f δεν εξαρτάται ρητά από το x , δηλαδή $f = f(y, y')$, η εξίσωση (1.15) παίρνει τη μορφή

$$f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} = \text{σταθερή}. \quad (1.16)$$

Συναρτήσεις με Πολλές Εξαρτημένες Μεταβλητές

Η εξίσωση του Euler (1.16) αποτελεί λύση του προβλήματος μεταβολών, στο οποίο αναζητούμε μοναδική συνάρτηση $y(x)$, με την οποία το ολοκλήρωμα του συναρτησιακού λαμβάνει τοπικό ακρότατο. Ας υποθέσουμε, τώρα, ότι η f είναι συνάρτηση, η οποία εξαρτάται από πολλές εξαρτημένες μεταβλητές, δηλαδή

$$f = f(\mathbf{y}(x), \mathbf{y}'(x), x), \quad (1.17)$$

όπου $\mathbf{y} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ είναι μια διανυσματική συνάρτηση με συνιστώσες $\mathbf{y}(x) = (y_1(x), y_2(x), \dots, y_d(x))^T$, ενώ, με $\mathbf{y}'(x) = (y'_1(x), y'_2(x), \dots, y'_d(x))^T$, συμβολίζουμε το διάνυσμα των παραγώγων των συνιστωσών της $\mathbf{y}$ ως προς x .

Και σε αυτήν την περίπτωση, όπου η f είναι πραγματική συνάρτηση, ορίζουμε τη μεταβολή της y_k συνιστώσας της $\mathbf{y}$ ως

$$y_k(a, x) = y_k(x) + ag_k(x), \quad k = 1, 2, \dots, d. \quad (1.18)$$

Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία με εκείνη της σχέσης (1.9), εξάγουμε ότι

$$G'(a) = \int_{x_1}^{x_2} \sum_{k=1}^d \left(\frac{\partial f}{\partial y_k} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'_k} \right) g_k(x) dx. \quad (1.19)$$

Οι συναρτήσεις $g_k(x)$ μπορούν να θεωρηθούν ανεξάρτητες μεταξύ τους. Για να παρουσιάζει τοπικό ακρότατο η G στο $a = 0$ πρέπει να ισχύει ότι $G'(0) = 0$. Κατά συνέπεια, οι όροι που εμφανίζονται στη σχέση (1.19) πρέπει να μηδενίζονται ξεχωριστά, δηλαδή

$$\frac{\partial f}{\partial y_k} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, d. \quad (1.20)$$

Συμβολισμός Μεταβολής

Ορίζουμε έναν πιο αφηρημένο συμβολισμό μεταβολής, δηλαδή, δJ τη μεταβολή του J , και $\delta \hat{y}$ τη μεταβολή της $\hat{y}$.

$$\begin{cases} \delta J := \frac{\partial J}{\partial a} da, \\ \delta \hat{y} := \frac{\partial \hat{y}}{\partial a} da, \end{cases} \quad (1.21)$$

άρα

$$\frac{\partial J}{\partial a} da = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial \hat{y}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \hat{y}_x} \right) \frac{\partial \hat{y}}{\partial a} da dx, \quad (1.22)$$

επομένως, μέσω της (1.21), η (1.22) διατυπώνεται ως

$$\delta J = \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial f}{\partial \hat{y}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \hat{y}_x} \right) \delta \hat{y} dx \quad (1.23)$$

Με τον συμβολισμό της μεταβολής που χρησιμοποιήσαμε παραπάνω, για να παρυσιάζει το J ακρότατο στη συνάρτηση $y(x)$, πρέπει να ισχύει ότι

$$\delta \int_{x_1}^{x_2} f(y(x), y'(x), x) dx = 0, \quad (1.24)$$

καταλήγουμε, επομένως, στην εξίσωση του Euler (1.10)

Οι εξισώσεις Euler–Lagrange, που εξήχθησαν προηγουμένως, εφαρμόζονται στην ανάλυση της κίνησης ενός σωματιδίου υπό την επίδραση συντηρητικών δυνάμεων. Στη συνέχεια, μελετούμε ένα χαρακτηριστικό φυσικό σύστημα, για να αναδείξουμε τη σύνδεση της θεωρίας με την κλασική μηχανική, μέσω της περιγραφής της κίνησης σε ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων.

Κίνηση Σωματιδίου σε Ορθογώνιες Συντεταγμένες

Σύμφωνα με το βιβλίο [6], θεωρούμε ένα σωματίδιο που κινείται σε ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων στον τρισδιάστατο χώρο, μέσα σε ένα συντηρητικό πεδίο δυνάμεων. Έστω ότι $\mathbf{x} : [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$, με $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t))^T$ τη θέση, και συμβολίζουμε με $\mathbf{x}'(t) = (x'_1(t), x'_2(t), x'_3(t))^T$ την ταχύτητα του σωματιδίου τη χρονική στιγμή t .

Το συντηρητικό πεδίο δυνάμεων $\mathbf{F} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ ορίζεται ως εξής

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (F_1(\mathbf{x}), F_2(\mathbf{x}), F_3(\mathbf{x}))^T. \quad (1.25)$$

Η κινητική ενέργεια $T : \mathbb{R}^3 \rightarrow [0, +\infty)$ είναι συνάρτηση μόνο της ταχύτητας και δίνεται από τον παρακάτω τύπο

$$T(\mathbf{x}') = \frac{1}{2}m(x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2), \quad (1.26)$$

όπου m η μάζα του σωματιδίου. Η δυναμική ενέργεια του σωματιδίου, $U : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, ορίζεται ως συνάρτηση της θέσης $U := U(\mathbf{x})$, και επειδή το πεδίο δυνάμεων είναι συντηρητικό, ικανοποιεί τη σχέση

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\nabla U(\mathbf{x}), \quad (1.27)$$

$$\text{όπου } \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3} \right)^T.$$

Ορίζουμε τη Λαγκρανζιανή συνάρτηση $L : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ του σωματιδίου ως τη διαφορά της κινητικής από τη δυναμική ενέργεια, δηλαδή

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := T(\mathbf{x}') - U(\mathbf{x}). \quad (1.28)$$

Αξίωμα 1 (Αρχή του Hamilton για το σωματίδιο βλ. βιβλίο [6]). Από όλες τις διαδρομές που μπορεί να ακολουθήσει ένα σωματίδιο μεταξύ δύο σημείων μέσα σε ένα καθορισμένο χρονικό διάστημα $[t_1, t_2]$, εκείνη που πραγματικά ακολουθεί, είναι αυτή που ελαχιστοποιεί το ολοκλήρωμα, ως προς το χρόνο της Λαγκρανζιανής συνάρτησης του συστήματος.

Η αρχή του Hamilton μπορεί να γραφτεί ως

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') dt = 0. \quad (1.29)$$

Οι εξισώσεις Euler στην περίπτωση όπου $f = L$, ονομάζονται εξισώσεις Euler–Lagrange και είναι

$$\frac{\partial L}{\partial x_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial x'_k} = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (1.30)$$

Συνεχίζουμε, θεωρώντας ένα γενικευμένο μηχανικό σύστημα μέσα σε ένα συντηρητικό πεδίο δυνάμεων που αποτελείται από $n \in \mathbb{N}$, διακριτά σωματίδια. Υποθέτουμε ότι για να προσδιορίσουμε πλήρως τη θέση του χρειαζόμαστε, $d \in \mathbb{N}$, βαθμούς ελευθερίας, δηλαδή d το πλήθος των ανεξάρτητων συντεταγμένων $q_1, q_2, \dots, q_d$, στις οποίες αναφερόμαστε και ως γενικευμένες συντεταγμένες. Ορίζουμε τις γενικευμένες ταχύτητες $q'_1, q'_2, \dots, q'_d$ ως τις παραγώγους ως προς t , και θέτουμε

$$\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_d)^T \quad \text{και} \quad \mathbf{q}' = (q'_1, q'_2, \dots, q'_d)^T. \quad (1.31)$$

Αρχικά, περιγράφουμε την κίνηση των σωματιδίων σε ορθογώνιες συντεταγμένες

$$\mathbf{x}_a(t) = (x_{a,1}(t), x_{a,2}(t), x_{a,3}(t))^T, \quad a = 1, 2, \dots, n, \quad (1.32)$$

και στη συνέχεια μετασχηματίζουμε τις ορθογώνιες συντεταγμένες των σωματιδίων στις γενικευμένες συντεταγμένες του συστήματος, κάνοντας την υπόθεση ότι το σύστημα έχει χρονική ομοιογένεια, δηλαδή, στις παρακάτω εξισώσεις μετασχηματισμού δεν περιέχεται ρητά ο χρόνος,

$$\mathbf{x}_a(t) = \mathbf{x}_a(\mathbf{q}), \quad a = 1, 2, \dots, n. \quad (1.33)$$

Οι ορθογώνιες συντεταγμένες των ταχυτήτων εξαρτώνται από τις γενικευμένες συντεταγμένες και τις γενικευμένες ταχύτητες, δηλαδή

$$\mathbf{x}'_a(t) = \mathbf{x}_a(\mathbf{q}, \mathbf{q}'), \quad a = 1, 2, \dots, n. \quad (1.34)$$

Οι Εξισώσεις κίνησης του Langrage σε γενικευμένες συντεταγμένες

Για να μελετήσουμε τις εξισώσεις κίνησης του Lagrange σε γενικευμένες συντεταγμένες, επαναδιατυπώνουμε την Αρχή του Hamilton για ένα μηχανικό σύστημα, που αποτελείται από πλήθος σωματιδίων, δηλαδή για ένα σύστημα πολλών βαθμών ελευθερίας.

Αξίωμα 2 (Επαναδιατύπωση της Αρχή του Hamilton για μηχανικό σύστημα βλ. βιβλίο [6]). Από όλες τις διαδρομές που μπορεί να ακολουθήσει ένα μηχανικό σύστημα κινούμενο από ένα σημείο σε ένα άλλο μέσα σε ένα ορισμένο χρονικό διάστημα, η πραγματική διαδρομή που ακολουθεί είναι αυτή που ελαχιστοποιεί το ολοκλήρωμα ως προς το χρόνο της Λαγκρανζιανής συνάρτησης του συστήματος.

Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι η Λαγκρανζιανή παραμένει αναλλοίωτη στους μετασχηματισμούς συντεταγμένων (1.33) και (1.34), δηλαδή η μορφή της Λαγκρανζιανής δεν αλλάζει και παραμένει συνάρτηση των γενικευμένων συντεταγμένων και ταχυτήτων του συστήματος, γράφεται ως

$$L(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = T(\mathbf{q}, \mathbf{q}') - U(\mathbf{q}). \quad (1.35)$$

Επομένως, η αρχή του Hamilton διατυπώνεται ως

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(\mathbf{q}, \mathbf{q}') dt = 0. \quad (1.36)$$

Συνεπώς, οι εξισώσεις Euler (1.20), οι οποίες αντιστοιχούν στο πρόβλημα μεταβολών (1.36), είναι

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial q'_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, d. \quad (1.37)$$

Οι εξισώσεις αυτές ονομάζονται εξισώσεις Lagrange για την κίνηση του συστήματος και ισχύουν, καθώς όλες οι δυνάμεις του συστήματος προκύπτουν από τη δυναμική ενέργεια, δηλαδή

$$F(\mathbf{q}) = -\nabla U(\mathbf{q}), \quad (1.38)$$

όπου $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_d} \right)^T$.

Η Κινητική Ενέργεια του Μηχανικού Συστήματος

Η κινητική ενέργεια σε σταθερές ορθογώνιες συντεταγμένες ορίζεται ως

$$T = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{i=1}^3 m_a x_{a,i}'^2, \quad (1.39)$$

όπου m_a είναι η μάζα κάθε σωματιδίου στο σύστημα.

Επειδή έχουμε υποθέσει ότι το σύστημα έχει χρονική ομοιογένεια, τότε, σε γενικευμένες συντεταγμένες, ισχύει

$$\begin{cases} x_{a,i} = x_{a,i}(\mathbf{q}), & i = 1, 2, 3, \quad a = 1, 2, \dots, n, \\ x'_{a,i} = \sum_{k=1}^d \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_k} q'_k, & i = 1, \dots, 3, \quad a = 1, \dots, n. \end{cases} \quad (1.40)$$

Τότε

$$x_{a,i}'^2 = \left(\sum_{k=1}^d \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_k} q_k' \right)^2 = \sum_{k=1}^d \sum_{j=1}^d \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_k} \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_j} q_j' q_k', \quad i = 1, 2, 3, \quad a = 1, 2, \dots, n, \quad (1.41)$$

και η κινητική ενέργεια του συστήματος (1.39) γίνεται

$$T = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \sum_{i=1}^3 m_a \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_j} \frac{\partial x_{a,i}}{\partial q_k} q_j' q_k' = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d a_{jk} q_j' q_k'. \quad (1.42)$$

Παραγωγίζοντας την παραπάνω σχέση ως προς q_l' , λαμβάνουμε

$$\frac{\partial T}{\partial q_l'} = \sum_{k=1}^d a_{lk} q_k' + \sum_{j=1}^d a_{jl} q_j', \quad l = 1, 2, \dots, d, \quad (1.43)$$

και, ως αποτέλεσμα, προκύπτει ότι

$$\sum_{l=1}^d q_l' \frac{\partial T}{\partial q_l'} = \sum_{k=1}^d \sum_{l=1}^d a_{lk} q_k' q_l' + \sum_{j=1}^d \sum_{l=1}^d a_{jl} q_j' q_l', \quad (1.44)$$

συνεπώς, καταλήγουμε

$$\sum_{l=1}^d q_l' \frac{\partial T}{\partial q_l'} = 2T. \quad (1.45)$$

Διατήρηση της Ενέργειας Μηχανικού Συστήματος

Η Λαγκρανζιανή του συστήματος (1.35) δεν εξαρτάται ρητά από το χρόνο t , αλλά μόνο από τις γενικευμένες συντεταγμένες $\mathbf{q}$ και τις γενικευμένες ταχύτητες $\mathbf{q}'$. Ισχύει

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0, \quad (1.46)$$

επομένως, μέσω της δεύτερης μορφής της εξίσωσης του Euler (1.15), για $f = L$ καταλήγουμε στη σχέση

$$L - \sum_{\kappa=1}^d q_\kappa' \frac{\partial L}{\partial q_\kappa'} = \text{σταθερή} := -H. \quad (1.47)$$

Εφόσον η δυναμική ενέργεια εξαρτάται μόνο από τις γενικευμένες συντεταγμένες του συστήματος, ενώ η κινητική εξαρτάται τόσο από αυτές όσο και από τις γενικευμένες ταχύτητες, ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις

$$\frac{\partial U}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial q'_k} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, d. \quad (1.48)$$

Άρα,

$$\frac{\partial L}{\partial q'_k} = \frac{\partial(T - U)}{\partial q'_k} = \frac{\partial T}{\partial q'_k}, \quad k = 1, 2, \dots, d, \quad (1.49)$$

και η σχέση (1.47) παίρνει τη μορφή

$$L - \sum_{k=1}^d q'_k \frac{\partial T}{\partial q'_k} = \text{σταθερή} = -H. \quad (1.50)$$

Συνεπώς, από τις (1.45) και (1.50) παίρνουμε

$$T + U = H = \text{σταθερή}. \quad (1.51)$$

Η ποσότητα H ονομάζεται Χαμιλτονιανή του συστήματος και αντιπροσωπεύει την ολική ενέργεια του συστήματος, καθώς ισχύουν οι εξής προϋποθέσεις:

- Οι εξισώσεις μετασχηματισμού, που συνδέουν τις ορθογώνιες με τις γενικευμένες συντεταγμένες, δεν εξαρτώνται ρητά από το χρόνο t .
- Η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται από τις γενικευμένες ταχύτητες, αλλά μόνο από τις γενικευμένες συντεταγμένες.

Οι Εξισώσεις Κίνησης του Hamilton

Στη συνέχεια, θα αποδείξουμε τις εξισώσεις κίνησης του Hamilton με χρήση των εξισώσεων του Lagrange, οι οποίες περιγράφουν τη δυναμική του συστήματος μέσω γενικευμένων συντεταγμένων και γενικευμένων ταχυτήτων.

Ορίζουμε τις γενικευμένες ορμές $p_1, p_2, \dots, p_d$, του συστήματος ως

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial q'_k}, \quad k = 1, \dots, d. \quad (1.52)$$

Τότε, οι εξισώσεις του Lagrange (1.37) για την κίνηση του συστήματος γίνονται

$$p'_k = \frac{\partial L}{\partial q_k}, \quad k = 1, \dots, d. \quad (1.53)$$

Μέσω του ορισμού των γενικευμένων ορμών, η σχέση (1.47) για τη Χαμιλτονιανή γράφεται

$$H = \sum_{k=1}^d p_k q'_k - L. \quad (1.54)$$

Συμβολίζουμε τις γενικευμένες ορμές με το διάνυσμα $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_d)^T$ και εκφράζουμε τις γενικευμένες ταχύτητες ως

$$q'_k = q'_k(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad k = 1, \dots, d. \quad (1.55)$$

Στην εξίσωση (1.54) ορίζουμε τη συνάρτηση

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T \mathbf{q}' - L(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \sum_{k=1}^d p_k q'_k - L(\mathbf{q}, \mathbf{q}'). \quad (1.56)$$

Η συνάρτηση $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ ονομάζεται συνάρτηση του Hamilton ή Χαμιλτονιανή, και οι μεταβλητές $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ καλούνται κανονικές μεταβλητές. Παραγωγίζοντας και τα δύο μέλη της (1.56) ως προς τη γενικευμένη συντεταγμένη q_l , προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial q_l} &= \frac{\partial}{\partial q_l} \left(\sum_{k=1}^d p_k q'_k - L \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial q_l} (p_l q'_l) - \frac{\partial L}{\partial q_l} \\ &= \frac{\partial p_l}{\partial q_l} q'_l + \frac{\partial q'_l}{\partial q_l} p_l - \frac{\partial L}{\partial q_l}, \end{aligned} \quad (1.57)$$

και, καθώς η γενικευμένη ορμή p_l δεν εξαρτάται από τη γενικευμένη θέση q_l , καταλήγουμε

$$\frac{\partial H}{\partial q_l} = \frac{\partial q'_l}{\partial q_l} p_l - \frac{\partial L}{\partial q_l} - \frac{\partial L}{\partial q'_l} \frac{\partial q'_l}{\partial q_l}. \quad (1.58)$$

Η σχέση (1.58), σύμφωνα με τις (1.52) και (1.53), δίνει

$$\frac{\partial H}{\partial q_l} = -p'_l, \quad l = 1, \dots, d. \quad (1.59)$$

Παραγωγίζοντας και τα δύο μέλη της (1.56) ως προς τη γενικευμένη ορμή p_l , προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial p_l} &= \frac{\partial}{\partial p_l} \left(\sum_{k=1}^d p_k q'_k - L \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial p_l} (p_l q'_l) - \frac{\partial L}{\partial p_l} \\ &= q'_l + \frac{\partial q'_l}{\partial p_l} p_l - \frac{\partial L}{\partial q'_l} \frac{\partial q'_l}{\partial p_l}, \end{aligned} \quad (1.60)$$

και, χρησιμοποιώντας τη σχέση (1.52), καταλήγουμε

$$\frac{\partial H}{\partial p_l} = q'_l, \quad l = 1, \dots, d. \quad (1.61)$$

Οι εξισώσεις (1.59) και (1.61) είναι γνωστές ως εξισώσεις κίνησης του Hamilton και η περιγραφή της δυναμικής του μηχανικού συστήματος μέσω αυτών ονομάζεται Χαμιλτονιανή Δυναμική.

1.2 Χαμιλτονιανά Συστήματα

Στη συνέχεια, ορίζουμε πότε ένα δυναμικό σύστημα χαρακτηρίζεται ως Χαμιλτονιανό. Αυτό συμβαίνει όταν η χρονική εξέλιξη των λύσεων, δηλαδή των γενικευμένων θέσεων και ορμών, καθορίζεται πλήρως από μία μοναδική συνάρτηση, τη Χαμιλτονιανή, η οποία σε πολλές περιπτώσεις ταυτίζεται με την ολική ενέργεια του συστήματος. Ας θεωρήσουμε ένα γενικό Χαμιλτονιανό σύστημα με $d \in \mathbb{N}$ βαθμούς ελευθερίας, δηλαδή με d ανεξάρτητες γενικευμένες συντεταγμένες που περιγράφουν πλήρως τη θέση του συστήματος. Οι συντεταγμένες αυτές μπορεί να είναι, για παράδειγμα, καρτεσιανές, γωνιακές, μήκη τόξου κατά μήκος μιας καμπύλης, κ.λπ.

Υποθέτουμε ότι η Χαμιλτονιανή του συστήματος $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ είναι μία συνάρτηση δύο φορές διαφορίσιμη, ορισμένη σε ένα ανοικτό σύνολο $\mathbb{U} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, και δίνεται από τον τύπο

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T \mathbf{q}' - L(\mathbf{q}, \mathbf{q}'). \quad (1.62)$$

Η κίνηση του Χαμιλτονιανού συστήματος περιγράφεται από το σύστημα διαφορικών εξισώσεων

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \\ \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \end{cases} \quad (1.63)$$

όπου

$$\nabla_{\mathbf{q}} = \left(\frac{\partial}{\partial q_1}, \frac{\partial}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_d} \right)^T, \quad \nabla_{\mathbf{p}} = \left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_d} \right)^T.$$

Εναλλακτικά, χρησιμοποιούμε τη συμπαγή μορφή

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = J^{-1} \nabla H(\mathbf{y}), \quad (1.64)$$

όπου

$$\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})^T, \quad \nabla = (\nabla_{\mathbf{p}}, \nabla_{\mathbf{q}})^T, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.65)$$

Ο πίνακας I είναι ο μοναδιαίος πίνακας διάστασης $d \times d$, ενώ ο πίνακας J έχει διάσταση $2d \times 2d$ και είναι αντισυμμετρικός, δηλαδή ικανοποιεί τη σχέση $J^T = -J$. Επιπλέον, ισχύει $J^{-1} = -J$. Ο πίνακας J ονομάζεται πίνακας δομής του Χαμιλτονιανού συστήματος που περιγράφεται από τη σχέση (1.64).

Ορισμός 1 (Συμπλεκτική Απεικόνιση). Έστω $\mathbb{U} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ ανοικτό σύνολο. Μία διαφορίσιμη απεικόνιση $g = (g_1, g_2, \dots, g_{2d})^T : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ ονομάζεται συμπλεκτική, εάν ο Ιακωβιανός πίνακας

$$\mathbf{g}'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial p_1} & \frac{\partial g_1}{\partial p_2} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial p_d} & \frac{\partial g_1}{\partial q_1} & \frac{\partial g_1}{\partial q_2} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial q_d} \\ \frac{\partial g_2}{\partial p_1} & \frac{\partial g_2}{\partial p_2} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial p_d} & \frac{\partial g_2}{\partial q_1} & \frac{\partial g_2}{\partial q_2} & \dots & \frac{\partial g_2}{\partial q_d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_{2d}}{\partial p_1} & \frac{\partial g_{2d}}{\partial p_2} & \dots & \frac{\partial g_{2d}}{\partial p_d} & \frac{\partial g_{2d}}{\partial q_1} & \frac{\partial g_{2d}}{\partial q_2} & \dots & \frac{\partial g_{2d}}{\partial q_d} \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

είναι παντού συμπλεκτικός, δηλαδή αν ικανοποιεί τη σχέση

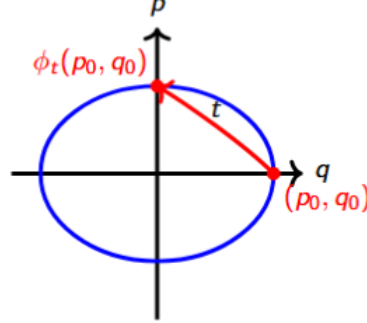
$$\mathbf{g}'(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \mathbf{g}'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J, \quad \forall (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{U}, \quad (1.67)$$

όπου $J \in \mathbb{R}^{2d \times 2d}$ ο πίνακας που ορίστηκε στη (1.65).

Πριν ορίσουμε τη ροή, ας εξετάσουμε την έννοιά της στο πλαίσιο ενός Χαμιλτονιανού συστήματος. Η ροή αναφέρεται στην εξέλιξη των καταστάσεων του συστήματος στον χώρο φάσης με το πέρασμα του χρόνου. Ο χώρος φάσης αποτελεί το σύνολο των δυνατών καταστάσεων του συστήματος, το οποίο περιλαμβάνει τις γενικευμένες συντεταγμένες $\mathbf{q}$ και τις αντίστοιχες γενικευμένες ορμές $\mathbf{p}$. Στο Χαμιλτονιανό σύστημα, η ροή περιγράφει πώς η αρχική κατάσταση $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ εξελίσσεται και μεταβάλλεται με την πάροδο του χρόνου.

Ορισμός 2 (Ροή Χαμιλτονιανού Συστήματος). Έστω ανοικτό σύνολο $\mathbb{U} \subset \mathbb{R}^{2d}$. Η ροή $\phi_t : \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ ενός Χαμιλτονιανού συστήματος είναι η απεικόνιση που, σε κάθε αρχική συνθήκη $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{U}$, αντιστοιχεί τη λύση $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ του συστήματος κατά χρόνο t , δηλαδή

$$\phi_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \quad \forall (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{U}. \quad (1.68)$$



Σχήμα 1.1

Θεώρημα 1 (Poincaré βλ. βιβλίο [3]). Έστω ότι η $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ είναι δύο φορές διαφορίσιμη συνάρτηση στο $\mathbb{U} \subset \mathbb{R}^{2d}$. Τότε, για σταθερό t , η ροή ϕ_t είναι συμπλεκτικός μετασχηματισμός στο $\mathbb{U}$.

Απόδειξη. Η παράγωγος $\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0}$, με $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$, είναι λύση της εξίσωσης

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = J^{-1} \nabla^2 H(\phi_t(\mathbf{y}_0)) \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right), \quad (1.69)$$

όπου $\nabla^2 H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ είναι ο Εσσιανός πίνακας της H , δηλαδή είναι ένα μπλοκ τεσσάρων πινάκων $d \times d$ που δημιουργεί ένα πίνακα διάστασης $2d \times 2d$ με στοιχεία τις μερικές παραγώγους δεύτερης τάξης της H , δηλαδή

$$\nabla^2 H = \begin{pmatrix} H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_0} & H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0} \\ H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{p}_0} & H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{q}_0} \end{pmatrix}. \quad (1.70)$$

Θέτοντας $\mathbf{p}_0 = (p_{01}, \dots, p_{0d})^T$ και $\mathbf{q}_0 = (q_{01}, \dots, q_{0d})^T$, έχουμε ότι $H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_0}$, $H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0}$, $H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{p}_0}$ και $H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{q}_0}$ είναι οι παρακάτω πίνακες διάστασης $d \times d$ με στοιχεία

$$H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{p}_0} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_{0i}^2} \right), \quad H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p_{0i} \partial q_{0i}} \right), \quad i = 1, 2, \dots, d, \quad (1.71)$$

$$H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{p}_0} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_{0i} \partial p_{0i}} \right), \quad H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{q}_0} = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_{0i}^2} \right), \quad i = 1, 2, \dots, d. \quad (1.72)$$

Μπορούμε εύκολα να δούμε ότι, στην περίπτωση που $H_{\mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0} = H_{\mathbf{q}_0 \mathbf{p}_0}$, ο Εσσιανός πίνακας είναι συμμετρικός, δηλαδή ισχύει

$$\nabla^2 H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \nabla^2 H(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T. \quad (1.73)$$

Σύμφωνα με τη σχέση (1.69) έχουμε ότι

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) &= \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) + \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) \\ &= \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T \nabla^2 H(\phi_t(\mathbf{y}_0)) J^{-T} J \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) \\ &\quad + \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T \nabla^2 H(\phi_t(\mathbf{y}_0)) J^{-1} J \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right). \end{aligned} \quad (1.74)$$

Παρατηρούμε ότι $J^{-T} = -J$ και $J^{-T} J = -I$ και, συνεπώς, καταλήγουμε στη σχέση

$$\frac{d}{dt} \left(\left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = 0, \quad (1.75)$$

από όπου, συμπεραίνουμε ότι

$$\left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} = \text{σταθερή}, \quad \forall t > 0. \quad (1.76)$$

Συνεπώς, ικανοποιείται για $t = 0$ (ϕ_0 είναι η ταυτοτική απεικόνιση), άρα

$$\left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = \left(\frac{\partial \phi_0}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \phi_0}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = J, \quad \forall t > 0, \quad \forall (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{U}. \quad (1.77)$$

□

1.2.1 Ιδιότητες Χαμιλτονιανών Συστημάτων

Η ροή ϕ_t ενός Χαμιλτονιανού συστήματος είναι ένας συμπλεκτικός μετασχηματισμός, όπως αποδείξαμε με το θεώρημα του Poincaré. Αυτό σημαίνει ότι η ροή διατηρεί τη γεωμετρική δομή του χώρου φάσης, δηλαδή τη συμπλεκτική μορφή. Από αυτό προκύπτει η πρώτη ιδιότητα, δηλαδή η χρονική διατήρηση του όγκου στον χώρο φάσης.

Πρόταση 1 (Πρώτη Ιδιότητα). *Για συστήματα με έναν βαθμό ελευθερίας ($d = 1$), αυτό αντιστοιχεί στη χρονική διατήρηση του εμβαδού στο χώρο φάσης. Στη γενική περίπτωση, για κάθε συμπαγές σύνολο $\mathbb{A} \subset \mathbb{U} \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, όπου $\mathbb{U}$ είναι το πεδίο ορισμού της ροής, ισχύει ότι*

$$\mu(\phi_t(\mathbb{A})) = \mu(\mathbb{A}), \quad \forall t > 0. \quad (1.78)$$

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας τη συμπλεκτικότητα της ροής ϕ_t , συμβολίζουμε με $\phi'_t = \frac{\partial \phi_t}{\partial \mathbf{y}_0}$ και μέσω των ιδιοτήτων της ορίζουσας ενός πίνακα καθώς και της σχέσης (1.77), καταλήγουμε

$$\det((\phi'_t)^T) \det(J) \det(\phi'_t) = \det(J). \quad (1.79)$$

Επειδή ένας πίνακας έχει την ίδια ορίζουσα με τον ανάστροφό του και $\det(J) = 1$, συμπεραίνουμε ότι

$$|\det(\phi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0))| = 1, \quad \forall (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \in \mathbb{U}, \quad (1.80)$$

όπου $\mathbb{U}$ το πεδίο ορισμού της ροής ϕ_t . Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι για οποιοδήποτε συμπαγές σύνολο $\mathbb{A} \subset \mathbb{U}$ ισχύει

$$\begin{aligned} \mu(\phi_t(\mathbb{A})) &= \iint_{\mathbb{A}} |\det(\phi'_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0))| d\mathbf{p}_0 d\mathbf{q}_0 \\ &= \iint_{\mathbb{A}} 1 d\mathbf{p}_0 d\mathbf{q}_0 = \mu(\mathbb{A}), \quad t > 0. \end{aligned} \quad (1.81)$$

□

Πρόταση 2 (Δεύτερη Ιδιότητα). *Η Χαμιλτονιανή $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ διατηρείται χρονικά, γεγονός που δηλώνει ότι το σύστημα είναι συντηρητικό, χωρίς μεταβολή ενέργειας κατά την εξέλιξή του, δηλαδή*

$$\frac{dH}{dt} = 0. \quad (1.82)$$

Απόδειξη. Αρχικά, βλέπουμε ότι

$$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{d\mathbf{q}}{dt} \right)^T \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \left(\frac{d\mathbf{p}}{dt} \right)^T \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (1.83)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{k=1}^d \left(q'_k \frac{\partial H}{\partial q_k} + p'_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \right). \quad (1.84)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.59) και (1.61), καταλήγουμε στην

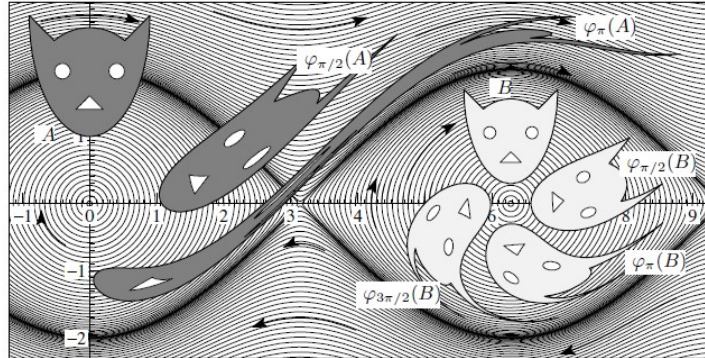
$$\frac{dH}{dt} = \sum_{k=1}^d \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} \right) = 0, \quad (1.85)$$

δηλαδή, συμπεραίνουμε ότι $H(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) = \text{σταθερή}$, $\forall t \geq 0$, και συνεπώς, το Χαμιλτονιανό σύστημα είναι συντηρητικό. $\square$

Για την ενίσχυση της κατανόησης των θεωρητικών αποτελεσμάτων που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, θεωρείται απαραίτητο να παρασχεθεί μια απεικόνιση της δυναμικής συμπεριφοράς του συστήματος στο χώρο φάσης. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται μια χαρακτηριστική απεικόνιση της ροής στο χώρο φάσης, η οποία αφορά το Χαμιλτονιανό σύστημα του εκκρεμούς, το οποίο περιγράφεται από το μη γραμμικό σύστημα πρώτης τάξης

$$\begin{cases} q' = p, \\ p' = -\sin q. \end{cases} \quad (1.86)$$

Το Χαμιλτονιανό σύστημα του εκκρεμούς έχει Χαμιλτονιανή $H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos q = \text{σταθερή}$.



Σχήμα 1.2: Απεικόνιση της διατήρησης του εμβαδού της ροής στο χώρο φάσης του Χαμιλτονιανού συστήματος του εκκρεμούς κατά τη χρονική εξέλιξη, βλ. βιβλίο [3].

Από τα παραπάνω γίνεται σαφές ότι, για την εις βάθος κατανόηση της δυναμικής ενός Χαμιλτονιανού συστήματος, απαιτείται όχι μόνο θεωρητική ανάλυση, αλλά και απεικόνιση της ροής στο χώρο φάσης. Για την αξιόπιστη προσομοίωση, είναι απαραίτητη η χρήση αριθμητικών μεθόδων που διασφαλίζουν γεωμετρική ευστώνεια και ακρίβεια. Στο επόμενο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι συμπλεκτικές μέθοδοι, σχεδιασμένες ώστε να διατηρούν βασικές γεωμετρικές ιδιότητες, όπως η διατήρηση της ροής, προσφέροντας ακριβή και αξιόπιστη αριθμητική επίλυση.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΣΥΜΠΛΕΚΤΙΚΕΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Ένας αριθμητικός ολοκληρωτής είναι μία οικογένεια απεικονίσεων $\Phi_h(\mathbf{y})$ στον φασικό χώρο που προσεγγίζει την ακριβή ροή $\phi_t(\mathbf{y})$ του διαφορικού συστήματος. Ο στόχος της γεωμετρικής ολοκλήρωσης είναι η κατασκευή και η μελέτη αριθμητικών μεθόδων της μορφής $\mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_h(\mathbf{Y}_n)$, $\mathbf{Y}_0$ δεδομένο, οι οποίες υπολογίζουν προσεγγίσεις που κληρονομούν ορισμένες από τις ποιοτικές ιδιότητες της ακριβούς λύσης. Στην περίπτωση των Χαμιλτονιανών συστημάτων μας ενδιαφέρουν μέθοδοι αυτής της μορφής με τη Φ_h να ικανοποιεί ένα διακριτό ανάλογο της ιδιότητας της συμπλεκτικότητας που διαθέτει η ϕ_t , βλ. (1.77).

Διακριτοποίηση Προβλήματος Αρχικών Τιμών

Έστω $T > 0$, $\mathbf{f} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, $\mathbf{g} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$, και $\mathbf{p}^0 \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{q}^0 \in \mathbb{R}^d$. Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών, ζητούνται καμπύλες $\mathbf{p} : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ και $\mathbf{q} : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{p}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), & 0 < t \leq T, \\ \mathbf{q}'(t) = \mathbf{g}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), & 0 < t \leq T, \\ \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}^0, \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}^0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Κεφάλαιο 2

Για το παραπάνω πρόβλημα αρχικών τιμών (2.1) η ύπαρξη και η μοναδικότητα της λύσης εξασφαλίζεται με το παρακάτω θεώρημα:

Θεώρημα 2 (Ύπαρξη και μοναδικότητα λύσεων, βλ. βιβλίο [1]). Έστω $\mathbf{F} = (\mathbf{f}, \mathbf{g}) : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ μία συνεχής συνάρτηση. Λέμε ότι η $\mathbf{F}$ ικανοποιεί τοπικά τη συνθήκη *Lipschitz* ως προς τη μεταβλητή $\mathbf{y}$, όπου $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})^T$, αν για κάθε $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^{2d}$ υπάρχει γειτονιά $\mathbb{U} \subset \mathbb{R}^{2d}$ του $\mathbf{y}_0$ και σταθερά $L_{\mathbb{U}} > 0$ τέτοια ώστε

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{y}_1) - \mathbf{F}(\mathbf{y}_2)\| \leq L_{\mathbb{U}} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|, \quad \forall \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \in \mathbb{U}. \quad (2.2)$$

Αντίθετα, η $\mathbf{F}$ ικανοποιεί ολικά τη συνθήκη *Lipschitz*, εάν υπάρχει σταθερά $L \geq 0$ τέτοια ώστε

$$\forall t \in [0, T], \quad \forall \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \in \mathbb{R}^{2d} : \quad \|\mathbf{F}(\mathbf{y}_1) - \mathbf{F}(\mathbf{y}_2)\| \leq L \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|. \quad (2.3)$$

Τότε, για κάθε αρχική τιμή $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)^T \in \mathbb{R}^{2d}$, το πρόβλημα (2.1) έχει μοναδική λύση. Στην ειδική περίπτωση των Χαμιλτονιανών συστημάτων της μορφής

$$\mathbf{y}' = \mathbf{J}^{-1} \nabla H(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2d}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

η *Lipschitz* συνθήκη ικανοποιείται τοπικά, εάν η Χαμιλτονιανή $H(\mathbf{y})$ είναι συνάρτηση δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη, δηλαδή $H \in C^2(\mathbb{U})$. Συνεπώς, εγγύεται την τοπική ύπαρξη και τη μοναδικότητα της λύσης του Χαμιλτονιανού συστήματος. Επιπλέον, εάν η τροχιά του συστήματος παραμένει εντός συμπαγούς υποσυνόλου του $\mathbb{U}$ (λόγω διατήρησης της ενέργειας $H(\mathbf{y}(t)) = H(\mathbf{y}_0)$), τότε η λύση του Χαμιλτονιανού συστήματος επεκτείνεται μοναδικά σε όλο το χρονικό διάστημα $[0, +\infty)$, σύμφωνα με κλασικά αποτελέσματα (βλ., για παράδειγμα, [2]).

Στη συνέχεια, θα ασχοληθούμε με την αριθμητική λύση του προβλήματος αρχικών τιμών (2.1). Θεωρούμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του διαστήματος $[0, T]$, $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$, με $t_n = nh$, $n = 0, \dots, N$, όπου $h = \frac{T}{N}$ είναι το βήμα. Θα εφαρμόσουμε αριθμητικές μεθόδους για να υπολογίσουμε προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$ των ακριβών τιμών $(\mathbf{p}(t_n), \mathbf{q}(t_n))$, $n = 0, \dots, N$.

Αρχικά, εφαρμόζουμε τις μεθόδους του Euler, που είναι οι πιο απλές αριθμητικές μέθοδοι για τη λύση του συστήματος. Υπενθυμίζουμε τους τύπους τους και, στη συνέχεια, ορίζουμε τους αριθμητικούς τους ολοκληρωτές.

Κεφάλαιο 2

Η Άμεση Μέθοδος του Euler

Για τον υπολογισμό των $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $n = 0, \dots, N$, διακριτοποιούμε το (2.1) εφαρμόζοντας την άμεση μέθοδο του Euler, για δεδομένα $(\mathbf{P}_0, \mathbf{Q}_0) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ ζητούνται προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.5)$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι ο αριθμητικός ολοκληρωτής Φ_h για την άμεση μέθοδο του Euler δίνεται από τον τύπο

$$\Phi_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_n \\ \mathbf{Q}_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \\ \mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

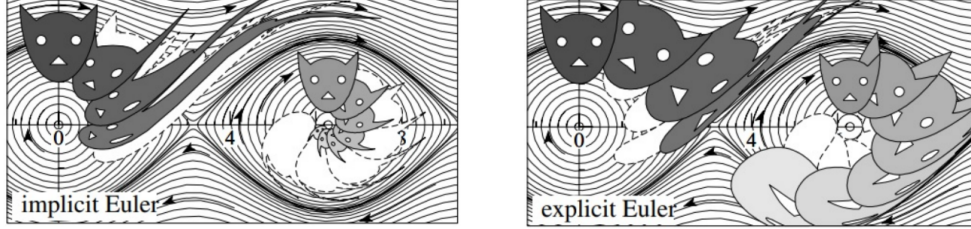
Η Πεπλεγμένη Μέθοδος του Euler

Για τον υπολογισμό των $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $n = 0, \dots, N$, διακριτοποιούμε το (2.1) εφαρμόζοντας την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler, για δεδομένα $(\mathbf{P}_0, \mathbf{Q}_0) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ ζητούνται προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.7)$$

Και στην περίπτωση της πεπλεγμένης μεθόδου του Euler, μπορούμε εύκολα να δούμε ότι ο αριθμητικός ολοκληρωτής Φ_h , που ορίζεται πεπλεγμένα, δίνεται από

$$\Phi_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = \begin{pmatrix} \mathbf{P}_n \\ \mathbf{Q}_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\Phi_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)) \\ \mathbf{g}(\Phi_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)) \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$



(α') Πεπλεγμένη Euler

(β') Άμεση Euler

Σχήμα 2.1: Λύνοντας αριθμητικά το σύστημα του εκκρεμούς, σύμφωνα με το βιβλίο [5], παρατηρούμε ότι το εμβαδόν στο χώρο φάσεων δε διατηρείται σε κάθε επανάληψη της αριθμητικής μεθόδου. Συνεπώς, οι αριθμητικοί ολοκληρωτές που προκύπτουν από τις κλασικές μεθόδους του Euler δεν είναι συμπλεκτικοί.

Η αριθμητική εφαρμογή των κλασικών μεθόδων Euler στο σύστημα του εκκρεμούς έδειξε ότι η συμπλεκτική δομή του συστήματος δε διατηρείται βλ. Σχήμα 2.1. Το γεγονός αυτό αναδεικνύει την ανάγκη για αριθμητικές μεθόδους που διατηρούν γεωμετρικές ιδιότητες των Χαμιλτονιανών συστημάτων. Στη συνέχεια ορίζουμε τι σημαίνει μία αριθμητική μέθοδος να είναι συμπλεκτική.

Ορισμός 3 (Συμπλεκτική Αριθμητική Μέθοδος, βλ. βιβλίο [3]). *Αν για μία αριθμητική μέθοδο $(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1}) = \Phi_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, όπου Φ_h ο αριθμητικός ολοκληρωτής με $h > 0$, ισχύει*

$$\Phi_h'(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)^T J \Phi_h'(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = J, \quad \forall (\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \in \mathbb{U}, \quad n = 0, \dots, N-1, \quad (2.9)$$

όταν εφαρμοστεί στο πρόβλημα αρχικών τιμών που περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις μέσω της σχέσης (1.63), όπου $\mathbb{U}$ το πεδίο ορισμού της H , τότε η αριθμητική μέθοδος ονομάζεται συμπλεκτική.

2.1 Συμπλεκτικές Μέθοδοι του Euler

Στις προηγούμενες παραγράφους είδαμε μέσω του σχήματος 2.1 ότι η άμεση και η πεπλεγμένη μέθοδος του Euler δεν ικανοποιούν την ιδιότητα της συμπλεκτικότητας, αφού δεν διατηρείται το εμβαδόν στο χώρο φάσεων. Θα δούμε τώρα δύο νέες μεθόδους, που προκύπτουν ως συνδυασμός αυτών των μεθόδων, οι οποίες όμως είναι συμπλεκτικές. Αυτές οι μέθοδοι είναι γνωστές ως συμπλεκτικές μέθοδοι του Euler. Οι συμπλεκτικές μέθοδοι του Euler προκύπτουν ως συνδυασμός της

άμεσης και της πεπλεγμένης μεθόδου του Euler, διακριτοποιώντας τη μεταβλητή $\mathbf{p}$ με την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler και τη μεταβλητή $\mathbf{q}$ με την άμεση μέθοδο του Euler, αντίστοιχα, και αντίστροφα.

Για δεδομένα $(\mathbf{P}_0, \mathbf{Q}_0) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ ζητούνται προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_n), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (2.10)$$

ή

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+1}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+1}), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.11)$$

Για τη μέθοδο (2.10), ο αριθμητικός ολοκληρωτής $\Phi_h^{(1)}$ ορίζεται ημιπεπεπλεγμένα, ως

$$\begin{aligned} \Phi_h^{(1)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) &= \begin{pmatrix} \Phi_{h,1}^{(1)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \\ \Phi_{h,2}^{(1)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{P}_n \\ \mathbf{Q}_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\Phi_{h,1}^{(1)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n), \mathbf{Q}_n) \\ \mathbf{g}(\Phi_{h,1}^{(1)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n), \mathbf{Q}_n) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ομοίως, ο αριθμητικός ολοκληρωτής $\Phi_h^{(2)}$, ο οποίος αντιστοιχεί στη μέθοδο (2.11), είναι ημιπεπλεγμένος και προκύπτει από την ακόλουθη σχέση

$$\begin{aligned} \Phi_h^{(2)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) &= \begin{pmatrix} \Phi_{h,1}^{(2)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \\ \Phi_{h,2}^{(2)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{P}_n \\ \mathbf{Q}_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \Phi_{h,2}^{(2)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)) \\ \mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \Phi_{h,2}^{(2)}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Στόχος μας είναι να μελετήσουμε τη γεωμετρική συμπεριφορά των απεικονίσεων $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$, οι οποίες προκύπτουν από την εφαρμογή των αριθμητικών μεθόδων (2.10) και (2.11) αντίστοιχα. Συγκεκριμένα, θα εξετάσουμε αν οι απεικονίσεις αυτές διατηρούν τη συμπλεκτική δομή του Χαμιλτονιανού συστήματος που περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις (1.63), δηλαδή αν είναι συμπλεκτικοί μετασχηματισμοί.

Θεώρημα 3. Οι απεικονίσεις $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$ είναι συμπλεκτικοί μετασχηματισμοί, όταν εφαρμόζονται στο Χαμιλτονιανό σύστημα (1.63).

Απόδειξη. Θα αποδείξουμε την ιδιότητα για το σχήμα (2.10), κάνοντας χρήση του κανόνα αλυσίδας

$$\begin{cases} (I + hH_{\mathbf{p}\mathbf{q}}) \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} = I, \\ (I + hH_{\mathbf{p}\mathbf{q}}) \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} = -hH_{\mathbf{q}\mathbf{q}}, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} - hH_{\mathbf{p}\mathbf{p}} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} - hH_{\mathbf{p}\mathbf{p}} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} = I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}}, \end{cases} \quad (2.14)$$

όπου $H_{\mathbf{p}\mathbf{p}}$, $H_{\mathbf{q}\mathbf{p}}$, $H_{\mathbf{p}\mathbf{q}}$ και $H_{\mathbf{q}\mathbf{q}}$ είναι οι $d \times d$ πίνακες των μερικών παραγώγων στο σημείο $(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_n)$, και I ο μοναδιαίος πίνακας διάστασης $d \times d$. Σε μορφή πινάκων, η (2.14) γράφεται

$$\begin{pmatrix} I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}} & 0 \\ -hH_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I \end{pmatrix} \frac{\partial(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1})}{\partial(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)} = \begin{pmatrix} I & -hH_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ 0 & I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Στην παραπάνω σχέση, συμβολίζουμε

$$\Phi_h^{(1)'}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = \frac{\partial(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1})}{\partial(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} & \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} & \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

Θεωρούμε

$$A = \begin{pmatrix} I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}}^T & 0 \\ -hH_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} I & -hH_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ 0 & I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

ισχύει

$$AJA^T = BJB^T = \begin{pmatrix} 0 & I + hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}} \\ -I - hH_{\mathbf{q}\mathbf{p}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Υποθέτουμε ότι A, B είναι αντιστρέψιμοι πίνακες και συμπεραίνουμε

$$\Phi_h^{(1)'}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)^T J \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = J, \quad \forall (\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \in \mathbb{U}, \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (2.19)$$

□

Ομοίως, αποδεικνύουμε για τη μέθοδο (2.11) ότι η απεικόνιση $\Phi_h^{(2)}$ είναι συμπλεκτικός μετασχηματισμός.

2.2 Μέθοδοι των Störmer–Verlet

Για τον υπολογισμό των $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $n = 0, \dots, N$, διακριτοποιούμε το (2.1), εφαρμόζοντας τις αριθμητικές μεθόδους των Störmer–Verlet, για δεδομένα $(\mathbf{P}_0, \mathbf{Q}_0) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ ζητούνται προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_n) + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{n+1}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{n+1}) \end{cases} \quad (2.20)$$

ή

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}). \end{cases} \quad (2.21)$$

Θεωρούμε τους αριθμητικούς ολοκληρωτές $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$ των μεθόδων (2.10) και (2.11). Ορίζουμε το διάνυσμα $\mathbf{Y}_n = (\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)^T$ ως τις προσεγγίσεις στους κόμβους t_n . Ακολουθώντας, με $\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}} = (\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}})^T$ και $\mathbf{Y}_{n+1} = (\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+1})^T$ συμβολίζουμε την προσεγγιστική λύση στους ενδιάμεσους κόμβους $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{h}{2}$ και στους κόμβους $t_{n+1} = t_n + h$, αντίστοιχα.

Είναι εύκολο να δούμε ότι η μέθοδος των Störmer–Verlet, που δίνεται από τη σχέση (2.20), μπορεί να γραφτεί ως σύνθεση των αριθμητικών ολοκληρωτών $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$, που έχουν οριστεί από τις σχέσεις (2.12) και (2.13) ως εξής

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_{h/2}^{(1)}(\Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_n)) \quad (2.22)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}} = \Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_n), \\ \mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}). \end{cases} \quad (2.23)$$

Για τη μέθοδο (2.20) ο αριθμητικός ολοκληρωτής $\Psi_h = \Phi_{h/2}^{(1)} \circ \Phi_{h/2}^{(2)}$ ορίζεται ημιπεπλεγμένα, ως

$$\Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_n) = \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n) \\ \Phi_{h/2,2}^{(2)}(\mathbf{Y}_n) \end{pmatrix} = \mathbf{Y}_n + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n), \mathbf{Q}_n) \\ \mathbf{g}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n), \mathbf{Q}_n) \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) &= \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n) \\ \Phi_{h/2,2}^{(2)}(\mathbf{Y}_n) \end{pmatrix} \\ &+ \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n), \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}})) \\ \mathbf{g}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_n), \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}})) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Ομοίως, μπορούμε να δούμε ότι η μέθοδος των Störmer–Verlet, που δίνεται από τη σχέση (2.21), μπορεί να γραφτεί ως σύνθεση των αριθμητικών ολοκληρωτών $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$, ως εξής

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_{h/2}^{(2)}(\Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n)) \quad (2.26)$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}} = \Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n), \\ \mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}). \end{cases} \quad (2.27)$$

Ομοίως, ο αριθμητικός ολοκληρωτής Ψ_h για τη μέθοδο (2.21) είναι ημιπεπλεγμένος και δίνεται από

$$\Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n) = \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(1)}(\mathbf{Y}_n) \\ \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n) \end{pmatrix} = \mathbf{Y}_n + \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\mathbf{P}_n, (\Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n))) \\ \mathbf{g}(\mathbf{P}_n, (\Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n))) \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+1/2}) &= \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) \\ \Phi_{h/2,2}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_{h/2,1}^{(1)}(\mathbf{Y}_n) \\ \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n) \end{pmatrix} \\ &+ \frac{h}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{f}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}), \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n)) \\ \mathbf{g}(\Phi_{h/2,1}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}), \Phi_{h/2,2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n)) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Οι αριθμητικές μέθοδοι που προκύπτουν από τη σύνθεση των αριθμητικών ολοκληρωτών $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$, είτε με τη σειρά $\Phi_h^{(1)} \circ \Phi_h^{(2)}$ είτε $\Phi_h^{(2)} \circ \Phi_h^{(1)}$, ισοδυναμούν με τις μεθόδους των Störmer–Verlet και εφαρμόζονται σε Χαμιλτονιανά συστήματα. Προκειμένου να τεκμηριωθεί η διατήρηση της συμπλεκτικής δομής κατά τη σύνθεση αυτή, διατυπώνεται το ακόλουθο γενικό θεώρημα που αφορά τη συμπλεκτικότητα σύνθετων μονοβηματικών μεθόδων.

Θεώρημα 4. *Η σύνθεση δύο μονοβηματικών αριθμητικών συμπλεκτικών μεθόδων είναι συμπλεκτική, όταν εφαρμόζεται σε Χαμιλτονιανό σύστημα που περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις της σχέσης (1.63).*

Απόδειξη. Έστω ότι οι δύο συμπλεκτικές μέθοδοι περιγράφονται από τις ακόλουθες απεικονίσεις

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_h^{(1)}(\mathbf{Y}_n), \\ \hat{\mathbf{Y}}_{n+1} = \Phi_h^{(2)}(\hat{\mathbf{Y}}_n), \end{cases} \quad (2.30)$$

με $\hat{\mathbf{Y}}_n = (\hat{\mathbf{P}}_n, \hat{\mathbf{Q}}_n)^T$, όπου οι αριθμητικοί ολοκληρωτές $\Phi_h^{(1)}$ και $\Phi_h^{(2)}$ είναι συμπλεκτικοί, δηλαδή, ικανοποιούν

$$\begin{cases} \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n)^T J \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n) = J, \\ \Phi_h^{(2)'}(\hat{\mathbf{Y}}_n)^T J \Phi_h^{(2)'}(\hat{\mathbf{Y}}_n) = J. \end{cases} \quad (2.31)$$

Θεωρούμε την αριθμητική μέθοδο $\mathbf{Y}_{n+1} = \Psi_h(\mathbf{Y}_n)$, όπου $\Psi_h = \Phi_h^{(2)} \circ \Phi_h^{(1)}$ και $\hat{\mathbf{Y}}_n = \Phi_h^{(1)}(\mathbf{Y}_n)$. Θα δείξουμε ότι η Ψ_h είναι επίσης συμπλεκτική μέθοδος. Πράγματι,

$$\begin{aligned} \Psi_h'(\mathbf{Y}_n)^T J \Psi_h'(\mathbf{Y}_n) &= \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n)^T \Phi_h^{(2)'}(\Phi_h^{(1)}(\mathbf{Y}_n))^T J \Phi_h^{(2)'}(\Phi_h^{(1)}(\mathbf{Y}_n)) \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n) \\ &= \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n)^T \Phi_h^{(2)'}(\hat{\mathbf{Y}}_n)^T J \Phi_h^{(2)'}(\hat{\mathbf{Y}}_n) \Phi_h^{(1)'}(\mathbf{Y}_n), \end{aligned} \quad (2.32)$$

η οποία σύμφωνα με (2.31), δίνει

$$\Psi_h'(\mathbf{Y}_n)^T J \Psi_h'(\mathbf{Y}_n) = J, \quad \forall \mathbf{Y}_n \in \mathbb{U}, \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (2.33)$$

□

Συμπεραίνουμε ότι οι αριθμητικές μέθοδοι των Störmer–Verlet προκύπτουν ως συνθέσεις των συμπλεκτικών μεθόδων (2.10) και (2.11). Επομένως, σύμφωνα με το θεώρημα (4), οι εν λόγω μέθοδοι είναι συμπλεκτικές.

2.3 Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

Για τον υπολογισμό των $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $n = 0, \dots, N$, διακριτοποιούμε το (2.1), εφαρμόζοντας την πεπλεγμένη μέθοδο του μέσου, για δεδομένα $(\mathbf{P}_0, \mathbf{Q}_0) = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ ζητούνται προσεγγίσεις $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοιες ώστε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + hf \left(\frac{\mathbf{P}_{n+1} + \mathbf{P}_n}{2}, \frac{\mathbf{Q}_{n+1} + \mathbf{Q}_n}{2} \right), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + hg \left(\frac{\mathbf{P}_{n+1} + \mathbf{P}_n}{2}, \frac{\mathbf{Q}_{n+1} + \mathbf{Q}_n}{2} \right), \end{cases} \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (2.34)$$

Θεωρούμε ότι $\mathbf{F} = (\mathbf{f}, \mathbf{g})^T$ και $\mathbf{Y}_n = (\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)^T$. Για την πεπλεγμένη μέθοδο του μέσου, ο αριθμητικός ολοκληρωτής ορίζεται πεπλεγμένα ως

$$\Phi_h(\mathbf{Y}_n) = \mathbf{Y}_n + h\mathbf{F} \left(\frac{\Phi_h(\mathbf{Y}_n) + \mathbf{Y}_n}{2} \right). \quad (2.35)$$

Η πεπλεγμένη μέθοδος του μέσου μπορεί να γραφτεί ως σύνθεση της πεπλεγμένης και της άμεσης μεθόδου του Euler. Πράγματι, θεωρώντας αρχικά την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler (2.7) με βήμα $\frac{h}{2}$ και υπολογίζουμε την προσέγγιση της ακριβούς τιμής στον ενδιάμεσο κόμβο $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \frac{h}{2}$, δηλαδή

$$\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{Y}_n + \frac{h}{2}\mathbf{F}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) = \Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n). \quad (2.36)$$

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας την $\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}$ ως αρχική προσέγγιση, εκτελούμε μία επανάληψη της άμεσης μεθόδου του Euler με βήμα $\frac{h}{2}$ και υπολογίζουμε τη $\mathbf{Y}_{n+1}$, δηλαδή

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \Phi_{h/2}^{(2)}(\Phi_{h/2}^{(1)}(\mathbf{Y}_n)) = \Phi_{h/2}^{(2)}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}) = \mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{F}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}), \quad (2.37)$$

από τη σχέση (2.36) έχουμε

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + h\mathbf{F}(\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}). \quad (2.38)$$

Προσεγγίζουμε την τιμή $\mathbf{Y}_{n+\frac{1}{2}}$ από την $\frac{\mathbf{Y}_{n+1} + \mathbf{Y}_n}{2}$ και καταλήγουμε στην πεπλεγμένη μέθοδο του μέσου

$$\mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + h\mathbf{F} \left(\frac{\mathbf{Y}_{n+1} + \mathbf{Y}_n}{2} \right). \quad (2.39)$$

Θεώρημα 5. Για το αριθμητικό σχήμα (2.34) η απεικόνιση

$$\Phi_h : \begin{pmatrix} \mathbf{P}_n \\ \mathbf{Q}_n \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \mathbf{P}_{n+1} \\ \mathbf{Q}_{n+1} \end{pmatrix}$$

είναι συμπλεκτικός μετασχηματισμός.

Απόδειξη. Εφαρμόζοντας την αριθμητική μέθοδο σε ένα γενικό Χαμιλτονιανό σύστημα, αποδεικνύουμε, χρησιμοποιώντας τον κανόνα αλυσίδας, ότι

$$\left\{ \begin{aligned} \left(I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \right) \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} + \frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} &= I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}}, \\ \left(I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \right) \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} + \frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} &= -\frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}}, \\ \left(I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \right) \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} &= \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}}, \\ \left(I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \right) \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} &= I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}}, \end{aligned} \right. \quad (2.40)$$

όπου $H_{\mathbf{p}\mathbf{p}}$, $H_{\mathbf{q}\mathbf{q}}$, $H_{\mathbf{p}\mathbf{q}}$ και $H_{\mathbf{q}\mathbf{p}}$ είναι οι $d \times d$ πίνακες των μερικών παραγώγων δευτέρας τάξης, υπολογισμένοι στο σημείο $\left(\frac{\mathbf{P}_{n+1} + \mathbf{P}_n}{2}, \frac{\mathbf{Q}_{n+1} + \mathbf{Q}_n}{2} \right)$, και I είναι ο μοναδιαίος πίνακας διάστασης $d \times d$.

Η σχέση (2.40) σε μορφή πινάκων γράφεται ως

$$\begin{pmatrix} I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} & \frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ -\frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} & \frac{\partial \mathbf{P}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} \\ \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{P}_n} & \frac{\partial \mathbf{Q}_{n+1}}{\partial \mathbf{Q}_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} & -\frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \end{pmatrix}.$$

Θεωρούμε

$$A = \begin{pmatrix} I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} & \frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ -\frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} I - \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} & -\frac{h}{2} H_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \\ \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{p}} & I + \frac{h}{2} H_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

τότε υπολογίζουμε

$$AJA^T = BJB^T. \quad (2.42)$$

Υποθέτοντας ότι οι πίνακες A και B είναι αντιστρέψιμοι, προκύπτει ότι

$$\Phi'_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)^T J \Phi'_h(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) = J, \quad \forall (\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n) \in \mathbb{U}, \quad n = 0, \dots, N-1. \quad (2.43)$$

□

2.4 Αριθμητικές Μέθοδοι των Runge–Kutta

Έστω $T > 0$, $\mathbf{F} = (\mathbf{f}, \mathbf{g})^T : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ και $\mathbf{y}^0 = (\mathbf{p}^0, \mathbf{q}^0)^T \in \mathbb{R}^{2d}$. Θεωρούμε το πρόβλημα αρχικών τιμών και ζητάμε την καμπύλη $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})^T : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ που ικανοποιεί

$$\begin{cases} \mathbf{y}'(t) = \mathbf{F}(\mathbf{y}(t)), & 0 < t \leq T, \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}^0. \end{cases} \quad (2.44)$$

Ξαναγράφουμε έτσι το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.1) χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $\mathbf{F}$, $\mathbf{y}^0$ κ.λπ.

Έστω $k \in \mathbb{N}$, με $\tau_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, k$, (συνήθως $0 \leq \tau_i \leq 1$), $a_{ij} \in \mathbb{R}$ για $i, j = 1, \dots, k$ και $b_i \in \mathbb{R}$ για $i = 1, \dots, k$, με τα a_{ij} και τ_i να πληρούν τη σχέση

$$\tau_i = \sum_{j=1}^k a_{ij}, \quad i = 1, \dots, k. \quad (2.45)$$

Η γενική μέθοδος των Runge–Kutta με k ενδιάμεσα στάδια περιγράφεται από το μητρώο

$$\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1k} & \tau_1 \\ a_{21} & \cdots & a_{2k} & \tau_2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} & \tau_k \\ \hline b_1 & \cdots & b_k & \end{array} = \frac{A}{\mathbf{b}^T} \Big| \boldsymbol{\tau}, \quad (2.46)$$

όπου $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \dots, b_k)^T \in \mathbb{R}^k$ και $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_k)^T \in \mathbb{R}^k$. Θεωρούμε $N \in \mathbb{N}$, $h := \frac{T}{N}$, $t_n := nh$, $n = 0, \dots, N$. Συμβολίζουμε με $\mathbf{Y}_n$, $n = 0, \dots, N$, την αριθμητική προσέγγιση του διανύσματος της λύσης $\mathbf{y}(t_n)$ του (2.44) στο σημείο t_n , η οποία υπολογίζεται με τη μέθοδο RK με k ενδιάμεσα στάδια.

Σε κάθε διάστημα $[t_n, t_{n+1}]$ ορίζουμε τους κόμβους

$$t_{n,i} := t_n + \tau_i h, \quad i = 1, \dots, k. \quad (2.47)$$

Η μέθοδος RK που περιγράφεται από το μητρώο (2.46) διατυπώνεται μέσω της σχέσης, για $n = 0, \dots, N - 1$:

$$\begin{cases} \mathbf{Y}_0 := \mathbf{y}^0, \\ \mathbf{Y}_{n,i} = \mathbf{Y}_n + h \sum_{j=1}^k a_{ij} \mathbf{F}(\mathbf{Y}_{n,j}), \quad i = 1, \dots, k, \\ \mathbf{Y}_{n+1} = \mathbf{Y}_n + h \sum_{i=1}^k b_i \mathbf{F}(\mathbf{Y}_{n,i}). \end{cases} \quad (2.48)$$

Οι σχέσεις στη (2.48) περιγράφουν μία γενική μέθοδο RK με k ενδιάμεσα στάδια. Τα ενδιάμεσα στάδια $\mathbf{Y}_{n,i}$, $i = 1, \dots, k$, ορίζονται ως λύσεις ενός $2dk \times 2dk$ μη γραμμικού συστήματος.

Σύμφωνα με τη βιβλιογραφία, βλ. [1], οι Runge–Kutta μέθοδοι χωρίζονται σε δύο κύριες κατηγορίες, ανάλογα με τη μορφή του πίνακα A .

- Αν ο πίνακας A είναι αυστηρά κάτω τριγωνικός, η μέθοδος των Runge–Kutta είναι μία μονοβηματική μέθοδος *άμεση*, και ο υπολογισμός των $\mathbf{Y}_{n,i}$ γίνεται με απλή αντικατάσταση.
- Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις, η μέθοδος των Runge–Kutta είναι *πεπλεγμένη*, διότι για τον υπολογισμό των $\mathbf{Y}_{n,i}$ απαιτείται η λύση ενός μη γραμμικού συστήματος. Μία υποκατηγορία των πεπλεγμένων μεθόδων είναι οι *ημιπεπλεγμένες μέθοδοι RK*, στις οποίες ο πίνακας A είναι κάτω τριγωνικός.

Τάξης Σύγκλισης των μεθόδων των Runge–Kutta

Ας υποθέσουμε ότι $\mathbf{F} : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ και η λύση του προβλήματος $\mathbf{y} : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ είναι αρκετά ομαλή συνάρτηση. Για $n = 0, \dots, N - 1$, ορίζουμε τα $\zeta^{n,i}$, $\delta^n \in \mathbb{R}^{2d}$ ως εξής:

$$\begin{cases} \zeta^{n,i} = \mathbf{y}(t^n) + h \sum_{j=1}^q a_{ij} \mathbf{F}(\zeta^{n,j}), \quad i = 1, \dots, k, \\ \mathbf{y}(t^{n+1}) = \mathbf{y}(t^n) + h \sum_{i=1}^q b_i \mathbf{F}(\zeta^{n,i}) + \delta^n. \end{cases} \quad (2.49)$$

Το δ^n ονομάζεται σφάλμα συνέπειας ή τοπικό σφάλμα διακριτοποίησης, ή απλώς τοπικό σφάλμα της μεθόδου των Runge–Kutta.

Ορισμός 4 (Τάξη Σύγκλισης μιας μεθόδου των Runge–Kutta, βλ. βιβλίο [1]). Λέμε ότι η τάξη σύγκλισης μίας μεθόδου των Runge–Kutta είναι p , αν p είναι ο μεγαλύτερος θετικός ακέραιος για τον οποίο υπάρχει σταθερά $C > 0$, ανεξάρτητη των h και N , για οποιαδήποτε νόρμα $\|\cdot\|$ του $\mathbb{R}^{2d}$ ισχύει

$$\max_{0 \leq n \leq N-1} \|\delta^n\| \leq Ch^{p+1}. \quad (2.50)$$

Επειδή η εύρεση της τάξης σύγκλισης μιας μεθόδου των Runge–Kutta δεν είναι εύκολη υπόθεση, υπάρχουν στη βιβλιογραφία, βλέπε, για παράδειγμα, το βιβλίο [1], κάποιες απλοποιημένες συνθήκες, οι οποίες εξασφαλίζουν ότι μία μέθοδος των Runge–Kutta έχει τάξη ακρίβειας (τουλάχιστον) p , όταν εφαρμόζεται σε πρόβλημα αρχικών τιμών για αυτόνομο σύστημα διαφορικών εξισώσεων της μορφής (2.44). Στο παρακάτω θεώρημα αναφέρουμε ένα γνωστό αποτέλεσμα:

Θεώρημα 6 (Απλοποιημένες συνθήκες, βλ. βιβλίο [1]). Για το πρόβλημα αρχικών τιμών (2.44) υποθέτουμε ότι η $\mathbf{F}$ είναι αρκετά ομαλή στο $[0, T]$ και ότι η ίδια, καθώς και οι κατάλληλες μερικές παράγωγοι της, είναι φραγμένες στο $[0, T]$. Επιπλέον, υποθέτουμε ότι υπάρχουν ακέραιοι $p, s, r \geq 1$ τέτοιοι ώστε

$$\sum_{i=1}^q b_i \tau_i^k = \frac{1}{k+1}, \quad \text{για } 0 \leq k \leq p-1, \quad (2.51)$$

$$\sum_{j=1}^q a_{ij} \tau_j^k = \frac{\tau_j^{k+1}}{k+1}, \quad 1 \leq i \leq q, \quad \text{για } 0 \leq k \leq s-1, \quad (2.52)$$

$$\sum_{i=1}^q b_i \tau_i^k a_{ij} = \frac{b_j(1 - \tau_j^{k+1})}{k+1}, \quad 1 \leq j \leq q, \quad \text{για } 0 \leq k \leq r-1, \quad (2.53)$$

$$p \leq r + s + 1 \quad \text{και} \quad p \leq 2s + 2. \quad (2.54)$$

Τότε, η μέθοδος των Runge–Kutta έχει τάξη ακρίβειας τουλάχιστον p . Οι συνθήκες (2.51)–(2.54) ονομάζονται απλοποιημένες συνθήκες για τάξη ακρίβειας p .

2.4.1 Συμπλεκτικές μέθοδοι των Runge–Kutta

Σε αυτή την παράγραφο όπως έχουμε ήδη αναφέρει προηγουμένως, μας ενδιαφέρουν συμπλεκτικές μέθοδοι. Για αυτό το λόγο, θα διατυπώσουμε ένα αποτέλεσμα που εξασφαλίζει τη συμπλεκτικότητα των μεθόδων των Runge–Kutta βλ., για παράδειγμα, το βιβλίο [4].

Θεώρημα 7 (Συμπλεκτικότητα Runge–Kutta). Έστω ο $k \times k$ πίνακας M με στοιχεία

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j, \quad i, j = 1, 2, \dots, k \quad (2.55)$$

όπου a_{ij} , b_i όπως δίνονται στο μητρώο (2.46). Αν ο πίνακας M είναι μηδενικός, τότε η μέθοδος Runge–Kutta είναι συμπλεκτική.

Παρατήρηση: Η παραπάνω συνθήκη δεν είναι μόνο ικανή αλλά και αναγκαία για τη συμπλεκτικότητα των κλασικών μεθόδων των Runge–Kutta, όπως αποδεικνύεται στο άρθρο του Lasagni [7]. Συνεπώς, ο πίνακας M είναι μηδενικός αν και μόνο αν η μέθοδος είναι συμπλεκτική.

Για να κατανοήσουμε καλύτερα τη σημασία της παραπάνω συνθήκης, ας εξετάσουμε κάποιες κλασικές μεθόδους των Runge–Kutta. Αρχικά, είναι γνωστό ότι η άμεση μέθοδος του Euler (2.5), μπορεί να γραφτεί ως μέθοδο RK ενός σταδίου, με μητρώο

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 1 & \end{array}. \quad (2.56)$$

Ο πίνακας M σε αυτή την περίπτωση είναι μονοδιάστατος, του οποίου το στοιχείο m_{11} ικανοποιεί

$$m_{11} = a_{11}b_1 + a_{11}b_1 - b_1^2 = -1 \neq 0, \quad (2.57)$$

δηλαδή η άμεση μέθοδος του Euler δεν είναι συμπλεκτική.

Επίσης, η πεπλεγμένη μέθοδος του Euler (2.7) είναι μία μέθοδος των RK που περιγράφεται από το μητρώο

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline 1 & \end{array}. \quad (2.58)$$

Και σε αυτήν την περίπτωση, ο πίνακας M έχει μόνο ένα στοιχείο m_{11} που ικανοποιεί

$$m_{11} = a_{11}b_1 + a_{11}b_1 - b_1^2 = 1 \neq 0, \quad (2.59)$$

οπότε, και αυτή η μέθοδος δεν είναι συμπλεκτική. Υπενθυμίζουμε στον αναγνώστη ότι τόσο η άμεση όσο και η πεπλεγμένη μέθοδος του Euler έχουν τάξη ακρίβειας ίση με ένα, καθώς και οι δύο ικανοποιούν τις συνθήκες του θεωρήματος 6 για $p = 1$.

Αντιθέτως, η πεπλεγμένη μέθοδος του μέσου (2.34), η οποία περιγράφεται από το μητρώο

$$\begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline 1 & \end{array}, \quad (2.60)$$

παράγει πίνακα M του οποίου το στοιχείο είναι

$$m_{11} = a_{11}b_1 + a_{11}b_1 - b_1^2 = 0, \quad (2.61)$$

που σημαίνει ότι η μέθοδος είναι συμπλεκτική. Είναι γνωστό ότι η μέθοδος αυτή έχει τάξη σύγκλισης δύο, όπως προκύπτει από τις συνθήκες του θεωρήματος 6 για $p = 2$.

Στο παρακάτω θεώρημα διατυπώνουμε ένα γενικό αποτέλεσμα με τη συμπλεκτικότητα των μεθόδων των Runge–Kutta.

Θεώρημα 8. Όλες οι άμεσες μέθοδοι των Runge–Kutta με τάξη τουλάχιστον ένα, δεν είναι συμπλεκτικές.

Απόδειξη. Θεωρούμε μία άμεση μέθοδο των Runge–Kutta που περιγράφεται από το μητρώο (2.46), όπου ο πίνακας A είναι αυστηρά κάτω τριγωνικός. Είναι γνωστό από τη βιβλιογραφία, βλ. [1], ότι για να έχει μία μέθοδος των Runge–Kutta τάξη ακρίβειας τουλάχιστον ένα, αναγκαία συνθήκη είναι η

$$\sum_{i=1}^k b_i = 1. \quad (2.62)$$

Αν υποθέσουμε ότι η μέθοδος είναι συμπλεκτική, τότε, σύμφωνα με το θεώρημα (7), ο πίνακας M πρέπει να είναι μηδενικός. Επειδή η μέθοδος είναι άμεση, ισχύει

$$a_{ij} = 0, \quad \text{για } i \leq j, \quad i, j = 1, 2, \dots, k. \quad (2.63)$$

Εξετάζοντας τα διαγώνια στοιχεία του M , έχουμε

$$m_{ii} = -b_i^2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (2.64)$$

οπότε

$$b_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (2.65)$$

το οποίο είναι αδύνατον σύμφωνα με τη σχέση (2.62). Συνεπώς, μία άμεση μέθοδος των Runge–Kutta δεν μπορεί να είναι συμπλεκτική. $\square$

Η μέθοδος των Gauss–Legendre

Η αριθμητική μέθοδος των Gauss–Legendre είναι μια πεπλεγμένη μέθοδος Runge–Kutta δύο σταδίων, που περιγράφεται από το μητρώο

$$\begin{array}{cc|c} 1/4 & 1/4 - \sqrt{3}/6 & 1/2 - \sqrt{3}/6 \\ 1/4 + \sqrt{3}/6 & 1/4 & 1/2 + \sqrt{3}/6 \\ \hline 1/2 & 1/2 & \end{array} \quad (2.66)$$

Θα αποδείξουμε, χρησιμοποιώντας το θεώρημα (7), ότι η μέθοδος Gauss–Legendre είναι συμπλεκτική. Πράγματι, υπολογίζουμε τα στοιχεία του πίνακα M ως εξής

$$\begin{cases} m_{11} = a_{11}b_1 + a_{11}b_1 - b_1^2 = \frac{1}{4} \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0, \\ m_{12} = a_{12}b_1 + a_{21}b_2 - b_1b_2 = \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0, \\ m_{21} = a_{21}b_2 + a_{12}b_1 - b_2b_1 = \left(\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right) \frac{1}{2} + \left(\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0, \\ m_{22} = a_{22}b_2 + a_{22}b_1 - b_2^2 = \frac{1}{4} \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0. \end{cases} \quad (2.67)$$

Άρα, ικανοποιούνται οι συνθήκες του θεωρήματος (7) και, συνεπώς, η μέθοδος Gauss–Legendre είναι συμπλεκτική. Επιπλέον, είναι εύκολο ναδειχθεί ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου είναι τέσσερα, αφού ικανοποιούνται οι συνθήκες του θεωρήματος 6 για $p = 4$.

2.4.2 Συμπλεκτικές Διαμερισμένες Runge–Kutta (SPRK)

Μέχρι στιγμής, η διακριτοποίηση των εξαρτημένων μεταβλητών $\mathbf{p}$ και $\mathbf{q}$ στο πρόβλημα (2.44) έχει γίνει μέσω μίας μεθόδου RK με k ενδιαμέσα στάδια, που περιγράφεται από το μητρώο (2.46). Ας θεωρήσουμε δύο αριθμητικές μεθόδους RK με k ενδιαμέσα στάδια, οι οποίες περιγράφονται από τα μητρώα

$$\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1k} & \tau_1 \\ a_{21} & \cdots & a_{2k} & \tau_2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} & \tau_k \\ \hline b_1 & \cdots & b_k & \end{array} \quad \begin{array}{ccc|c} \hat{a}_{11} & \cdots & \hat{a}_{1k} & \hat{\tau}_1 \\ \hat{a}_{21} & \cdots & \hat{a}_{2k} & \hat{\tau}_2 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \hat{a}_{k1} & \cdots & \hat{a}_{kk} & \hat{\tau}_k \\ \hline \hat{b}_1 & \cdots & \hat{b}_k & \end{array} \quad (2.68)$$

Διακριτοποιούμε τη $\mathbf{p}$ με την πρώτη αριθμητική μέθοδο RK (το πρώτο μητρώο) και τη $\mathbf{q}$ με τη δεύτερη αριθμητική μέθοδο RK (το δεύτερο μητρώο), ή αντίστροφα. Τέτοιες μέθοδοι ονομάζονται διαμερισμένες RK. Οι συμπλεκτικές μέθοδοι του Euler και οι Störmer–Verlet, που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες παραγράφους, αποτελούν διαμερισμένες μεθόδους Runge–Kutta.

Για τον υπολογισμό των $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $n = 0, \dots, N$, διακριτοποιούμε την $\mathbf{p}$ του (2.44) με την πρώτη αριθμητική μέθοδο που περιγράφεται από το πρώτο μητρώο και τη $\mathbf{q}$ με τη δεύτερη αριθμητική μέθοδο που περιγράφεται από το δεύτερο μητρώο.

Ζητούνται $(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_n)$, $1 \leq n \leq N$, τέτοια ώστε $\mathbf{P}_0 = \mathbf{p}^0$, $\mathbf{Q}_0 = \mathbf{q}^0$ και

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n,i} = \mathbf{P}_n + h \sum_{j=1}^k a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,j}, \mathbf{Q}_{n,j}), & i = 1, \dots, k, \\ \mathbf{Q}_{n,i} = \mathbf{Q}_n + h \sum_{j=1}^k \hat{a}_{ij} \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,j}, \mathbf{Q}_{n,j}), & i = 1, \dots, k, \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h \sum_{i=1}^k b_i \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,i}, \mathbf{Q}_{n,i}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h \sum_{i=1}^k \hat{b}_i \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,i}, \mathbf{Q}_{n,i}). \end{cases} \quad (2.69)$$

Τάξη Σύγκλισης Διαμερισμένων Μεθόδων Runge–Kutta

Ακολουθώντας το βιβλίο [3], ορίζουμε τις αναγκαίες αλγεβρικές συνθήκες που πρέπει να ικανοποιούνται ώστε μια διαμερισμένη αριθμητική μέθοδος Runge–Kutta να έχει συγκεκριμένη τάξη ακρίβειας, όταν εφαρμόζεται σε πρόβλημα αρχικών τιμών για αυτόνομο σύστημα διαφορικών εξισώσεων της μορφής (2.44).

Μία διαμερισμένη αριθμητική μέθοδος Runge–Kutta έχει τάξη σύγκλισης ένα (τουλάχιστον), αν ικανοποιούνται οι ακόλουθες αλγεβρικές συνθήκες

$$\sum_{i=1}^k b_i = 1 \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \hat{b}_i = 1. \quad (2.70)$$

Η μέθοδος έχει τάξη σύγκλισης δύο (τουλάχιστον), αν ικανοποιούνται οι σχέσεις

(2.70) και επιπλέον ισχύουν

$$\sum_{i=1}^k b_i \tau_i = \frac{1}{2} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \hat{b}_i \hat{\tau}_i = \frac{1}{2}, \quad (2.71)$$

οι οποίες διασφαλίζουν ότι κάθε επιμέρους μέθοδος έχει τάξη σύγκλισης δύο (τουλάχιστον). Επιπλέον, απαιτείται να ικανοποιούνται και οι συνθήκες σύζευξης τάξης δύο (τουλάχιστον).

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \hat{b}_i a_{ij} = \frac{1}{2} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i \hat{a}_{ij} = \frac{1}{2}. \quad (2.72)$$

Τέλος, η διαμερισμένη μέθοδος έχει τάξη σύγκλισης τρία (τουλάχιστον), αν ικανοποιούνται οι συνθήκες (2.70), (2.71), καθώς και οι παρακάτω σχέσεις

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k b_i \tau_i^2 &= \frac{1}{3} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \hat{b}_i \hat{\tau}_i^2 = \frac{1}{3}, \\ \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i a_{ij} \tau_j &= \frac{1}{6} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \hat{b}_i \hat{a}_{ij} \hat{\tau}_j = \frac{1}{6}, \end{aligned} \quad (2.73)$$

οι οποίες εξασφαλίζουν ότι κάθε επιμέρους μέθοδος έχει τάξη σύγκλισης τρία (τουλάχιστον). Επιπλέον, πρέπει να πληρούνται οι συνθήκες σύζευξης τάξης δύο (τουλάχιστον), δηλαδή οι σχέσεις (2.72), καθώς και οι συνθήκες σύζευξης τάξης τρία (τουλάχιστον)

$$\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \hat{b}_i a_{ij} \tau_i = \frac{1}{6} \quad \text{και} \quad \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_i \hat{a}_{ij} \tau_i = \frac{1}{6}. \quad (2.74)$$

Θα διατυπώσουμε ένα θεώρημα που παρέχει μία ικανή συνθήκη ώστε μία διαμερισμένη μέθοδος Runge–Kutta να είναι συμπλεκτική.

Θεώρημα 9 (Συμπλεκτικότητα διαμερισμένων RK, βλ. βιβλίο [4]). *Αν οι συντελεστές a_{ij} , $\hat{a}_{ij}$, b_i και $\hat{b}_i$ της διαμερισμένης αριθμητικής μεθόδου (2.69) ικανοποιούν τις σχέσεις*

$$\begin{cases} b_i = \hat{b}_i, & i = 1, 2, \dots, k, \\ b_i \hat{a}_{ij} + \hat{b}_j a_{ji} - b_i \hat{b}_j = 0, & i, j = 1, 2, \dots, k, \end{cases} \quad (2.75)$$

τότε η διαμερισμένη αριθμητική μέθοδος είναι συμπλεκτική.

Συμπλεκτικές Μέθοδοι του Euler

Ας θεωρήσουμε τα μητρώα που περιγράφουν την άμεση μέθοδο του Euler και την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 1 & \end{array} \quad \begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline 1 & \end{array}$$

Διακριτοποιούμε την εξαρτημένη μεταβλητή $\mathbf{p}$ του προβλήματος (2.44) με την άμεση μέθοδο του Euler

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_n, \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n,1}), \end{cases} \quad (2.76)$$

την εξαρτημένη μεταβλητή $\mathbf{q}$, με την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n,1}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n,1}), \end{cases} \quad (2.77)$$

οπότε, από την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler προκύπτει ότι ισχύει $\mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_{n,1}$. Συνεπώς, λαμβάνουμε τη μέθοδο Συμπλεκτική Euler B (2.11)

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+1}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+1}). \end{cases} \quad (2.78)$$

Αντιστρόφως, διακριτοποιούμε τη μεταβλητή $\mathbf{q}$ του προβλήματος (2.44) με την άμεση μέθοδο του Euler

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_n, \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_n), \end{cases} \quad (2.79)$$

και τη μεταβλητή $\mathbf{p}$ με την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_n), \end{cases} \quad (2.80)$$

οπότε, από την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler για τη μεταβλητή $\mathbf{p}$, προκύπτει ότι ισχύει $\mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_{n,1}$. Επομένως, λαμβάνουμε τη μέθοδο Συμπλεκτική Euler A (2.10)

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + h\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_n). \end{cases} \quad (2.81)$$

Σύμφωνα με το θεώρημα 9, έχουμε

$$\begin{cases} b_1 = \widehat{b}_1 = 1, \\ b_1 \widehat{a}_{11} + \widehat{b}_1 a_{11} - b_1 \widehat{b}_1 = 0, \end{cases} \quad (2.82)$$

συνεπώς, οι συμπλεκτικές μέθοδοι του Euler είναι πράγματι συμπλεκτικές. Επιπλέον, καθώς ικανοποιούνται οι αλγεβρικές συνθήκες $b_1 = 1$ και $\widehat{b}_1 = 1$, οι μέθοδοι έχουν τάξη σύγκλισης ένα (τουλάχιστον). Επιπλέον, δεν ικανοποιείται η συνθήκη $b_1 \tau_1 = 0 \neq \frac{1}{2}$, που απαιτείται για να έχει η μέθοδος τάξη δύο (τουλάχιστον). Επομένως, η τάξη σύγκλισης των συμπλεκτικών μεθόδων Euler είναι ακριβώς ένα.

Μέθοδοι Störmer–Verlet

Θεωρούμε τα μητρώα που περιγράφουν δύο αριθμητικές μεθόδους Runge–Kutta

$$\begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 1 \\ \hline 1/2 & 1/2 & \end{array} \quad \begin{array}{cc|c} 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ \hline 1/2 & 1/2 & \end{array} \quad (2.83)$$

Διακριτοποιούμε τη μεταβλητή $\mathbf{p}$ του προβλήματος (2.44) με την πρώτη μέθοδο Runge–Kutta και έχουμε

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_n, \\ \mathbf{P}_{n,2} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \end{cases} \quad (2.84)$$

οπότε ισχύει $\mathbf{P}_{n,2} = \mathbf{P}_{n+1}$ και $\mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_n$.

Ενώ τη μεταβλητή $\mathbf{q}$ τη διακριτοποιούμε με τη δεύτερη μέθοδο Runge–Kutta

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}), \\ \mathbf{Q}_{n,2} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2} \mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \end{cases} \quad (2.85)$$

οπότε λαμβάνουμε $\mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_{n,2}$. Θεωρούμε τα προσεγγιστικά διανύσματα της θέσης στους χρονικούς κόμβους $t_{n+\frac{1}{2}}$, ως $\mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}} \approx \mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_{n,2}$. Επομένως, η μέθοδος γράφεται ως

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_n, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+1}, \mathbf{Q}_{n+\frac{1}{2}}), \end{cases} \quad (2.86)$$

και καταλήγουμε στη μέθοδο Störmer–Verlet B (2.21).

Αντίστροφα, διακριτοποιούμε τη μεταβλητή $\mathbf{q}$ με το πρώτο μητρώο, ως εξής

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_n, \\ \mathbf{Q}_{n,2} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \end{cases} \quad (2.87)$$

οπότε $\mathbf{Q}_{n,2} = \mathbf{Q}_{n+1}$ και $\mathbf{Q}_{n,1} = \mathbf{Q}_n$.

Ενώ τη μεταβλητή $\mathbf{p}$ με το δεύτερο μητρώο

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}), \\ \mathbf{P}_{n,2} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,1}, \mathbf{Q}_{n,1}) + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n,2}, \mathbf{Q}_{n,2}), \end{cases} \quad (2.88)$$

οπότε λαμβάνουμε $\mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_{n,2}$.

Θεωρούμε τα προσεγγιστικά διανύσματα της ορμής στους χρονικούς κόμβους $t_{n+\frac{1}{2}}$ να είναι $\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} \approx \mathbf{P}_{n,1} = \mathbf{P}_{n,2}$. Επομένως, η μέθοδος γράφεται

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{P}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_n), \\ \mathbf{Q}_{n+1} = \mathbf{Q}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_n) + \frac{h}{2}\mathbf{g}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{n+1}), \\ \mathbf{P}_{n+1} = \mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{P}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{Q}_{n+1}), \end{cases} \quad (2.89)$$

και καταλήγουμε στη μέθοδο Störmer–Verlet A (2.20).

Σύμφωνα με το θεώρημα 9, ισχύει

$$\begin{cases} b_i = \widehat{b}_i, & i = 1, 2, \\ b_i \widehat{a}_{ij} + \widehat{b}_j a_{ji} - b_i \widehat{b}_j = 0, & i, j = 1, 2, \end{cases} \quad (2.90)$$

οπότε οι μέθοδοι Störmer–Verlet είναι συμπλεκτικές. Επειδή ικανοποιούνται οι αλγεβρικές συνθήκες (2.70) και (2.71), οι αριθμητικές μέθοδοι έχουν τάξη σύγκλισης τουλάχιστον δύο. Για να αποδείξουμε ότι η τάξη σύγκλισης είναι ακριβώς δύο, αρκεί να δείξουμε ότι κάποια από τις αλγεβρικές συνθήκες της σχέσης (2.72), που απαιτούνται για τάξη τουλάχιστον τρία, δεν ικανοποιείται. Συγκεκριμένα, λαμβάνουμε ότι

$$\sum_{i=1}^2 b_i \tau_i^2 = \frac{1}{2} \neq \frac{1}{3}, \quad (2.91)$$

τότε, η τάξη σύγκλισης είναι ακριβώς δύο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΜΕΘΟΔΩΝ ΤΩΝ RUNGE–KUTTA ΚΑΙ ΤΩΝ ΔΙΑΜΕΡΙΣΜΕΝΩΝ RUNGE–KUTTA ΣΕ ΧΑΜΙΛΤΟΝΙΑΝΑ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ

Τα Χαμιλτονιανά προβλήματα, όπως το εκκρεμές, το πρόβλημα Lotka–Volterra και το πρόβλημα Kepler, παρουσιάζουν ιδιαίτερες προκλήσεις. Πρόκειται για συστήματα που χαρακτηρίζονται από την ύπαρξη διατηρητέων μεγεθών, όπως η Χαμιλτονιανή ή άλλες αναλλοίωτες ποσότητες, οι οποίες πρέπει να παραμένουν σταθερές κατά τη διάρκεια της αριθμητικής επίλυσης. Οι μέθοδοι Runge–Kutta και οι διαμερισμένες μέθοδοι Runge–Kutta διατηρούν σημαντικές γεωμετρικές ιδιότητες, όπως η συμπλεκτικότητα, εφόσον ικανοποιούνται τα θεωρήματα 7 και 9. Η επιβεβαίωση των θεωρητικών αυτών αποτελεσμάτων, μέσω της διατήρησης των αναλλοίωτων ποσοτήτων, αναδεικνύει την αποτελεσματικότητα και αξιοπιστία των μεθόδων αυτών.

3.1 Εκκρεμές

Το εκκρεμές (μάζα $m = 1$, αβαρής ράβδος μήκους $L = 1$, επιτάχυνση της βαρύτητας $g = 1$) αποτελεί ένα σύστημα με έναν βαθμό ελευθερίας, το οποίο περιγράφεται από μία αυτόνομη διαφορική εξίσωση

$$q'' + \sin(q) = 0. \quad (3.1)$$

Επειδή $q' = p$, οι εξισώσεις κίνησης του εκκρεμούς είναι

$$\begin{cases} q' = p = f(q, p), \\ p' = -\sin(q) = g(q, p). \end{cases} \quad (3.2)$$

Θα αποδείξουμε ότι το σύστημά μας είναι Χαμιλτονιανό και περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης στη σχέση (3.2). Πολλαπλασιάζοντας τη σχέση (3.1) με την ταχύτητα q' , και ολοκληρώνοντας, καταλήγουμε στη Χαμιλτονιανή

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \cos(q) = \text{σταθερή}, \quad (3.3)$$

και άρα ισχύει

$$\frac{\partial H}{\partial p} = q' \quad \text{και} \quad -\frac{\partial H}{\partial q} = p', \quad (3.4)$$

άρα, το σύστημα διαφορικών εξισώσεων στη σχέση (3.2) είναι Χαμιλτονιανό.

Θα μελετήσουμε ποιοτικά το σύστημα, ξεκινώντας από την εύρεση των σημείων ισορροπίας του, δηλαδή των σταθερών λύσεων του συστήματος.

Αρκεί να λύσουμε το εξής σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων

$$\begin{cases} f(q, p) = p = 0, \\ g(q, p) = -\sin(q) = 0. \end{cases} \quad (3.5)$$

Το παραπάνω αλγεβρικό σύστημα έχει άπειρες λύσεις της μορφής $(k\pi, 0)$, όπου $k \in \mathbb{Z}$. Οι λύσεις αυτές αποτελούν τα μοναδικά σημεία ισορροπίας του συστήματος (3.2). Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τα σημεία ισορροπίας ως προς την ευστάθεια. Θέτουμε $q = \bar{q} + \theta_1$, $p = \bar{p} + \theta_2$, και, γραμμικοποιώντας τις εξισώσεις, έχουμε

$$\begin{pmatrix} \theta_1'(t) \\ \theta_2'(t) \end{pmatrix} \approx J(\bar{q}, \bar{p}) \begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

όπου $J(\bar{q}, \bar{p})$ είναι ο Ιακωβιανός πίνακας των f, g στο σημείο ισορροπίας $(\bar{q}, \bar{p})$. Για το σύστημά μας, τα σημεία ισορροπίας που έχουμε είναι τα $(\bar{q}, \bar{p}) = (k\pi, 0)$, και ο Ιακωβιανός πίνακας των f, g είναι

$$J(q, p) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos(q) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Άρα, οι δύο ιδιοτιμές στα σημεία ισορροπίας $(k\pi, 0)$ προκύπτουν ως ρίζες της αλγεβρικής εξίσωσης

$$\det(J(k\pi, 0) - \lambda I_2) = \begin{vmatrix} \lambda & 1 \\ -\cos(k\pi) & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + \cos(k\pi) = 0. \quad (3.8)$$

Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις για $k \in \mathbb{Z}$:

- Για $k = 2m$, οι ιδιοτιμές του $J(2m\pi, 0)$ είναι $\lambda = \pm i$, και τα σημεία ισορροπίας $(2m\pi, 0)$ είναι ευσταθή κέντρα. Η διαταραχή γύρω από τα σημεία ισορροπίας $(2m\pi, 0)$ είναι

$$\begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix} = \mathbf{m}e^{it} + \mathbf{w}e^{-it}. \quad (3.9)$$

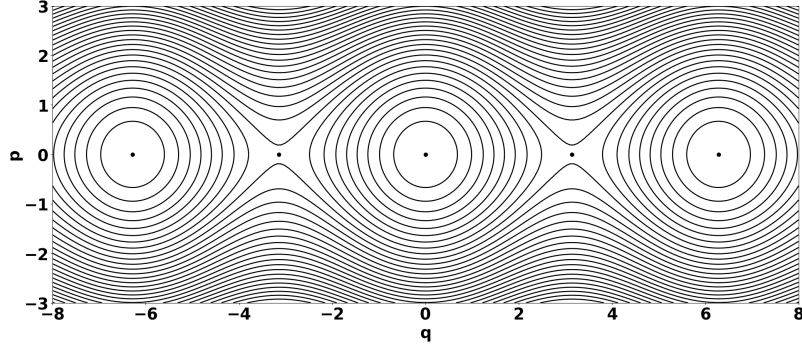
Άρα, οι συνιστώσες των λύσεων θ_1, θ_2 είναι περιοδικές γύρω από το σημείο ισορροπίας $(2m\pi, 0)$ με περίοδο $T = 2\pi$, και ο χώρος φάσεων γύρω του αποτελείται από κλειστές τροχιές.

- Για $k = 2m + 1$, οι ιδιοτιμές του $J((2m + 1)\pi, 0)$ είναι $\lambda = \pm 1$, και τα σημεία ισορροπίας $((2m + 1)\pi, 0)$ είναι ασταθή σάγματα. Η διαταραχή γύρω από τα σημεία ισορροπίας $((2m + 1)\pi, 0)$ είναι

$$\begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix} = \mathbf{m}e^t + \mathbf{w}e^{-t}. \quad (3.10)$$

1. Κατά μήκος του άξονα που είναι παράλληλος στο ιδιοδιάνυσμα $\mathbf{m}$, το οποίο αντιστοιχεί στη θετική ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1$, η διαταραχή αποκλίνει εκθετικά από τα σημεία ισορροπίας $((2m + 1)\pi, 0)$.
2. Κατά μήκος του άξονα που είναι παράλληλος στο ιδιοδιάνυσμα $\mathbf{w}$, το οποίο αντιστοιχεί στην αρνητική ιδιοτιμή $\lambda_2 = -1$, η διαταραχή συγχλίνει εκθετικά στο σημείο ισορροπίας $((2m + 1)\pi, 0)$.

Για να κατανοήσουμε τη συμπεριφορά των λύσεων (q, p) μακριά από τα σημεία ισορροπίας, εξετάζουμε αν το σύστημα (3.2) διαθέτει κάποια διατηρητέα ποσότητα. Η γνωστή διατηρητέα ποσότητα είναι η Χαμιλτονιανή, άρα κάθε λύση του συστήματος βρίσκεται σε καμπύλη στάθμης της εξίσωσης (3.3).



Σχήμα 3.1: Χώρος Φάσεων (q, p) των Καμπυλών Στάθμης της H .

3.1.1 Εφαρμογή Αριθμητικών Μεθόδων

Το σύστημα που περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις στη (3.2) έχει διατηρητέα ποσότητα στο χρόνο t . Για μία αρχική συνθήκη $(p(0), q(0))$ ισχύει

$$H(p(t), q(t)) = H(p(0), q(0)), \quad \forall t \in [0, T]. \quad (3.11)$$

Θεωρούμε την ακολουθία $(H_n)_{n=0}^N$ με $H_0 = H(p(0), q(0))$, που παράγεται από τον παρακάτω αναδρομικό τύπο

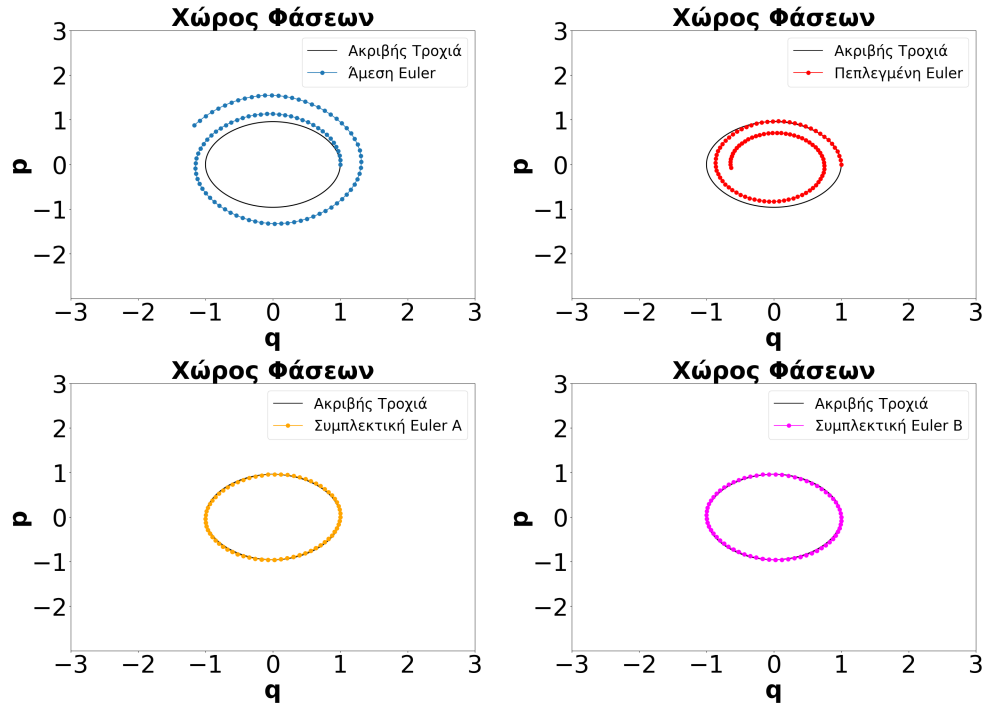
$$H_{n+1} = H(P_n, Q_n), \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.12)$$

όπου P_n, Q_n είναι οι προσεγγίσεις των ακριβών τιμών $p(t_n), q(t_n)$ στους κόμβους $t_n = nh$, $n = 0, 1, \dots, N$, όταν γίνεται η διακριτοποίηση με μια συγκεκριμένη αριθμητική μέθοδο για βήμα χρόνου $h > 0$ στο διάστημα χρόνου $[0, T]$. Το ολικό σφάλμα της διατηρητέας ποσότητας ορίζεται ως

$$\max_{1 \leq n \leq N} |H_n - H(t_n)|, \quad (3.13)$$

όπου $(H_n)_{n=1}^N$ οι προσεγγιστικές τιμές των ακριβών τιμών $(H(t_n))_{n=1}^N$ με αρχική τιμή H_0 .

Εφαρμόζουμε τις δύο μη συμπλεκτικές αριθμητικές μεθόδους, άμεση και πεπλεγμένη Euler, καθώς και τις συμπλεκτικές μεθόδους Euler, για να επιλύσουμε αριθμητικά το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (3.2). Στη συνέχεια, παριστάνουμε γραφικά



Σχήμα 3.2: Λύσεις του συστήματος του μαθηματικού εκκρεμούς (3.2) με βήμα χρόνου $h = 0.1$, για το πρόβλημα αρχικών τιμών $(q(0), p(0)) = (1, 0)$, που προκύπτουν με τη χρήση των τεσσάρων αριθμητικών μεθόδων, στο χρονικό διάστημα $[0, 10]$.

Παρατήρηση: Από το παραπάνω αριθμητικό πείραμα παρατηρούμε τις τροχιές των τεσσάρων μεθόδων στον χώρο φάσεων. Οι μη συμπλεκτικές μέθοδοι Euler, άμεση και πεπλεγμένη, εμφανίζουν λανθασμένη ποιοτική συμπεριφορά, δημιουργώντας τροχιές που σχηματίζουν σπείρες προς τα μέσα ή προς τα έξω, υποδηλώνοντας φθίνουσα ή αυξανόμενη ταλάντωση στην ορμή και στη θέση. Αντίθετα, οι συμπλεκτικές μέθοδοι του Euler παράγουν κλειστές τροχιές που μιμούνται πιστά την ακριβή λύση, διατηρώντας σταθερό το πλάτος της ταλάντωσης. Συνεπώς, οι συμπλεκτικές μέθοδοι είναι καταλληλότερες για τη σωστή απεικόνιση της δυναμικής του συστήματος του εκκρεμούς.

Παρακάτω παρουσιάζουμε αριθμητικά αποτελέσματα των συμπλεκτικών αριθμητικών μεθόδων Euler, Störmer–Verlet, της πεπλεγμένης μεθόδου του μέσου και της μεθόδου Gauss–Legendre για το ολικό σφάλμα της ενέργειας (Χαμιλτονιανής) (3.3), στο πρόβλημα αρχικών τιμών που περιγράφεται από τη (3.2) με αρχική συνθήκη $(q(0), p(0)) = (1, 0)$, στο χρονικό διάστημα $[0, 100]$

Πίνακας 3.1: Συμπλεκτική Euler A

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$2.261724e - 02$	1.031
0.050000	$1.106368e - 02$	1.015
0.025000	$5.473567e - 03$	1.007
0.012500	$2.722879e - 03$	1.003
0.006250	$1.357872e - 03$	1.001
0.003125	$6.780451e - 04$	-

Πίνακας 3.2: Συμπλεκτική Euler B

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$2.262202e - 02$	1.032
0.050000	$1.105978e - 02$	1.015
0.025000	$5.473706e - 03$	1.007
0.012500	$2.722897e - 03$	1.004
0.006250	$1.357869e - 03$	1.002
0.003125	$6.780445e - 04$	-

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδιπλασιάζεται, γεγονός που επιβεβαιώνει ότι η τάξη σύγκλισης των μεθόδων είναι ένα.

Πίνακας 3.3: Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$8.789166e - 05$	1.998
0.050000	$2.199761e - 05$	1.999
0.025000	$5.502554e - 06$	1.999
0.012500	$1.375755e - 06$	1.999
0.006250	$3.439462e - 07$	1.999
0.003125	$8.598702e - 08$	-

Πίνακας 3.4: Störmer-Verlet A

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$9.750734e - 04$	2.003
0.050000	$2.432859e - 04$	1.999
0.025000	$6.082897e - 05$	2.000
0.012500	$1.520583e - 05$	2.000
0.006250	$3.801368e - 06$	2.000
0.003125	$9.503365e - 07$	-

Πίνακας 3.5: Störmer-Verlet B

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$1.061233e - 03$	2.001
0.050000	$2.652090e - 04$	2.000
0.025000	$6.632475e - 05$	2.000
0.012500	$1.658116e - 05$	2.000
0.006250	$4.145287e - 06$	2.000
0.003125	$1.036322e - 06$	-

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποτετραπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας ότι η τάξη σύγκλισης των μεθόδων είναι δύο.

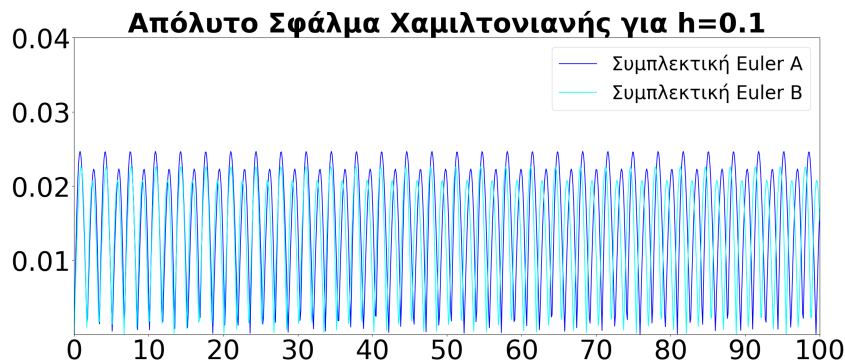
Πίνακας 3.6: Gauss–Legendre

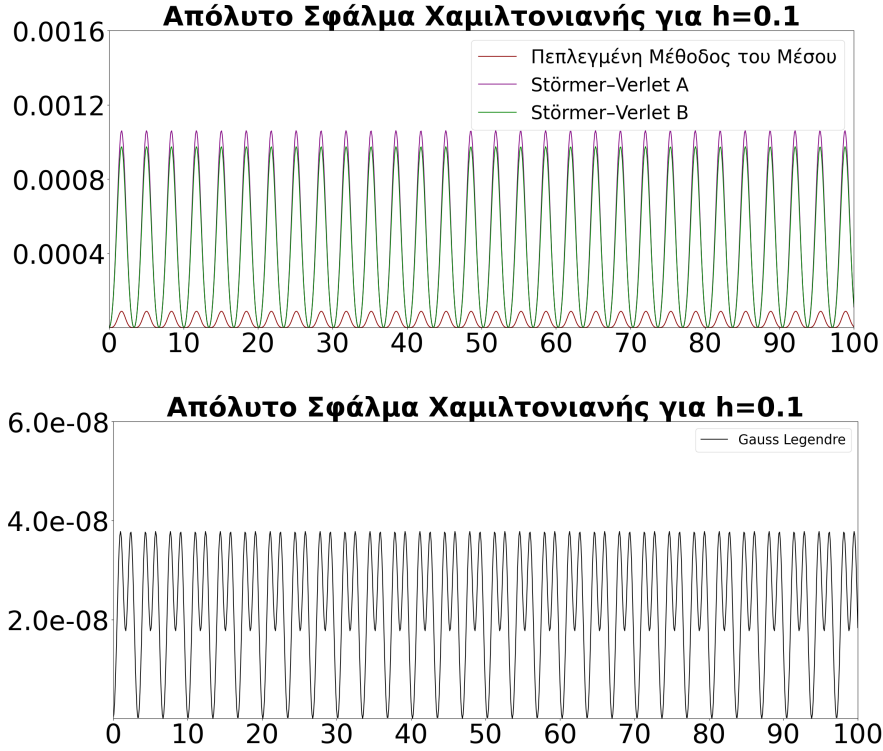
h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
0.100000	$3.780045e - 08$	4.003
0.050000	$2.358168e - 09$	4.001
0.025000	$1.473174e - 10$	4.000
0.012500	$9.209522e - 12$	4.000
0.006250	$5.756506e - 13$	3.999
0.003125	$3.819167e - 14$	-

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδεκαεξαπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου είναι τέσσερα.

Στις γραφικές παραστάσεις, αναμένουμε ψευδοπεριοδικότητα της συνάρτησης του απολύτου σφάλματος της Χαμιλτονιανής σε μακροχρόνιες προσομοιώσεις στον χρόνο. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι μια αριθμητική συμπλεκτική μέθοδος δεν επιλύει το αρχικό Χαμιλτονιανό σύστημα ακριβώς, αλλά λύνει ακριβώς ένα τροποποιημένο Χαμιλτονιανό σύστημα με Χαμιλτονιανή $\tilde{H}$, η οποία διαφέρει από την αρχική κατά $\mathcal{O}(h^p)$. Το συμπέρασμα αυτό προκύπτει από τη θεωρία του **Backward Error Analysis**, σύμφωνα με το βιβλίο [3].

Παρουσιάζουμε γραφικές παραστάσεις της απόλυτης τιμής του σφάλματος της Χαμιλτονιανής στο χρονικό διάστημα $[0, 100]$ για το ίδιο πρόβλημα αρχικών τιμών, χρησιμοποιώντας τις έξι συμπλεκτικές αριθμητικές μεθόδους





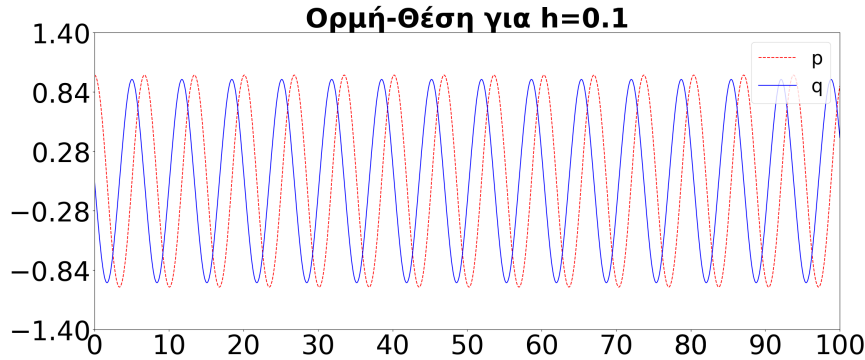
Παρατήρηση: Η ψευδοπεριοδικότητα του σφάλματος δείχνει την αξιοπιστία των συμπλεκτικών μεθόδων, καθώς διατηρούν το σφάλμα περιορισμένο και αποτρέπουν τη συσσώρευση του σε μεγάλα χρονικά διαστήματα, όπως το $[0, 100]$.

Το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής για κάθε μέθοδο, με βήμα χρόνου $h = 0.1$, είναι το εξής

Συμπλεκτική Euler A	$2.262202e - 02$
Συμπλεκτική Euler B	$2.261724e - 02$
Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου	$8.789166e - 05$
Störmer-Verlet A	$1.061233e - 03$
Störmer-Verlet B	$9.750734e - 04$
Gauss-Legendre	$3.780045e - 08$

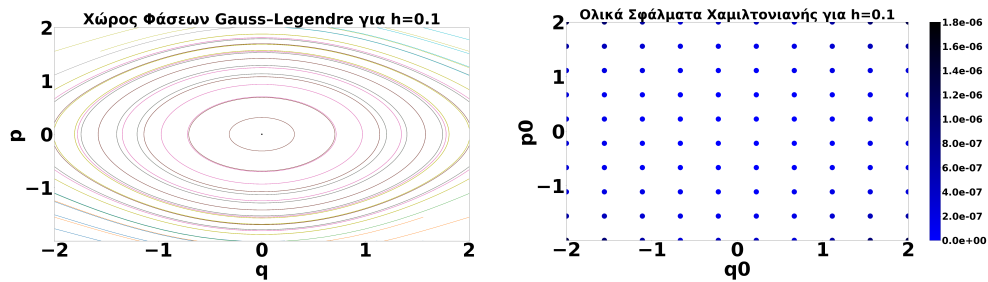
Πίνακας 3.7: Η συμπλεκτική μέθοδος Gauss-Legendre εμφανίζει υψηλότερη αριθμητική ακρίβεια, καθώς το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής είναι μικρότερο.

Παρουσιάζουμε παρακάτω την αριθμητική λύση του εκκρεμούς για το ίδιο πρόβλημα αρχικών τιμών, χρησιμοποιώντας τη συμπλεκτική αριθμητική μέθοδο Gauss–Legendre τέταρτης τάξης, η οποία είναι πιο ακριβής, στο διάστημα χρόνου $[0, 100]$



Σχήμα 3.3: Οι αριθμητικές λύσεις είναι ταλαντωτικές ως προς τον χρόνο, επιβεβαιώνοντας τη σωστή ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος.

Παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις του χώρου φάσεων για 100 προβλήματα αρχικών τιμών, των οποίων οι αρχικές συνθήκες ανήκουν σε ομοιόμορφο πλέγμα βήματος $k \approx 0.04$ στο τετράγωνο $[-2, 2] \times [-2, 2]$, χρησιμοποιώντας την αριθμητική μέθοδο Gauss–Legendre υψηλότερης τάξης (τέσσερα), στο διάστημα χρόνου $[0, 100]$.



Σχήμα 3.4: Παρατηρούμε ότι το μέγιστο ολικό σφάλμα της μεθόδου Gauss–Legendre είναι της τάξης του $e-06$ στο δεξιό σχήμα, επιβεβαιώνοντας την υψηλή ακρίβειά της στο πρόβλημα του εκκρεμούς. Επιπλέον, ο αριθμητικός χώρος φάσης στο αριστερό σχήμα προσεγγίζει ικανοποιητικά τον ακριβή.

3.2 Θηρευτής-Θήραμα

Προχωράμε στη μελέτη ενός δεύτερου Χαμιλτονιανού προβλήματος, θεωρώντας ένα οικοσύστημα όπου ζουν δύο είδη που αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Ο πληθυσμός κάθε είδους δεν μπορεί να περιγραφεί ανεξάρτητα, αλλά πρέπει να ληφθούν υπόψη οι πληθυσμοί και των δύο ειδών που υπάρχουν στο οικοσύστημα. Από μαθηματική σκοπιά, αυτό απαιτεί την επίλυση ενός συστήματος πεπλεγμένων διαφορικών εξισώσεων για τις μεταβλητές των πληθυσμών. Το σύστημα αυτό θα λυθεί αριθμητικά με τις συμπλεκτικές αριθμητικές μεθόδους, όπου τα αριθμητικά αποτελέσματα θα επιβεβαιώσουν τα θεωρητικά, δείχνοντας τη σωστή ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος σε μεγάλα χρονικά διαστήματα και την ακρίβεια των μεθόδων. Ο τύπος αλληλεπίδρασης που εξετάζουμε είναι του θηρευτή-θηράματος, όπου το ένα είδος τρέφεται με το άλλο, με αποτέλεσμα ο πληθυσμός του θηράματος να μειώνεται, ενώ αντίθετα ο πληθυσμός του θηρευτή να αυξάνεται.

Ας υποθέσουμε ότι οι συναρτήσεις $N(t)$ και $P(t)$ παριστάνουν δύο πληθυσμούς σε ένα οικοσύστημα, όπου ο πληθυσμός $P(t)$ αντιστοιχεί στους θηρευτές, οι οποίοι τρέφονται από τον πληθυσμό των θηραμάτων $N(t)$. Από την άλλη πλευρά, ο πληθυσμός των θηραμάτων τρέφεται από άλλες πηγές τροφής στο περιβάλλον, που δεν περιλαμβάνουν τον πληθυσμό των θηρευτών. Το πιο γνωστό μαθηματικό μοντέλο που περιγράφει τους πληθυσμούς των θηρευτών και των θηραμάτων είναι το μοντέλο Lotka–Volterra, σύμφωνα με το βιβλίο [9]

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = N(a - bP), \\ \frac{dP}{dt} = P(cN - d), \end{cases} \quad (3.14)$$

όταν ισχύουν οι εξής υποθέσεις:

1. Τα a , b , c και d είναι θετικές σταθερές, οι οποίες περιγράφουν:
 - a : Ρυθμός γέννησης των θηραμάτων.
 - d : Ρυθμός θνησιμότητας των θηρευτών.
 - b : Ρυθμός μείωσης των θηραμάτων λόγω αλληλεπίδρασης με τους θηρευτές.
 - c : Ρυθμός αύξησης των θηρευτών λόγω αλληλεπίδρασης με τα θηράματα.
2. Όταν δεν υπάρχουν θηρευτές στο οικοσύστημα, τα θηράματα αυξάνονται με ρυθμό ανάλογο του πληθυσμού τους.

3. Όταν δεν υπάρχουν θηράματα στο οικοσύστημα, οι θηρευτές πεθαίνουν με ρυθμό ανάλογο του πληθυσμού τους.
4. Το οικοσύστημα πρέπει να είναι κλειστό, δηλαδή δεν υπάρχει εισροή και εκροή πληθυσμών.
5. Οι πόροι για τα θηράματα στο περιβάλλον είναι απεριόριστοι, επιτρέποντας την άπειρη αύξηση του πληθυσμού των θηραμάτων υπό την απουσία θηρευτών.
6. Ο ρυθμός αύξησης των θηραμάτων περιλαμβάνει έναν αρνητικό όρο ($-bNP$), ενώ ο ρυθμός αύξησης των θηρευτών περιλαμβάνει έναν θετικό όρο (cNP) λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ τους.

Η αδιαστατοποίηση του (3.14) γίνεται με τη χρήση των παρακάτω σχέσεων

$$p(\tau) = \frac{cN(t)}{d}, \quad q(\tau) = \frac{bP(t)}{a}, \quad \tau = at, \quad z = \frac{d}{a}. \quad (3.15)$$

Με κανόνα αλυσίδας, λαμβάνουμε

$$\frac{dN}{dt} = \frac{dN}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \frac{dN}{d\tau} a = \frac{ad}{c} \frac{dp}{d\tau}, \quad (3.16)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{dP}{d\tau} \frac{d\tau}{dt} = \frac{dP}{d\tau} a = \frac{a^2}{b} \frac{dq}{d\tau}. \quad (3.17)$$

Η πρώτη διαφορική εξίσωση του (3.14), αντικαθιστώντας τις (3.15) και (3.16), προκύπτει

$$\frac{ad}{c} \frac{dp}{d\tau} = \frac{d}{c} p \left(a - \frac{ba}{b} q \right) = \frac{ad}{c} p(1 - q), \quad (3.18)$$

δηλαδή έχουμε

$$\frac{dp}{d\tau} = p(1 - q). \quad (3.19)$$

Ομοίως, για τη δεύτερη διαφορική εξίσωση του (3.14) χρησιμοποιώντας τη (3.15) και τη (3.17)

$$\frac{a^2}{b} \frac{dq}{d\tau} = \frac{a}{b} q \left(\frac{cd}{c} p - d \right) = \frac{da}{b} q(p - 1), \quad (3.20)$$

άρα, συμπεραίνουμε ότι

$$\frac{dq}{d\tau} = \frac{d}{a} q(p - 1) = zq(p - 1). \quad (3.21)$$

Από τις σχέσεις (3.19) και (3.21), παίρνουμε την αδιαστατοποιημένη μορφή του (3.14)

$$\begin{cases} \frac{dp}{d\tau} = p(1-q) = f(p,q), \\ \frac{dq}{d\tau} = zq(p-1) = g(p,q). \end{cases} \quad (3.22)$$

Το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (3.22) ονομάζεται αυτόνομο, διότι οι συναρτήσεις f και g δεν εξαρτώνται ρητά από τον αδιάστατο χρόνο τ , δηλαδή

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = 0, \quad \frac{\partial g}{\partial \tau} = 0. \quad (3.23)$$

Τέτοιου είδους δυναμικά συστήματα μελετώνται ποιοτικά, ξεκινώντας από την εύρεση των σημείων ισορροπίας τους, δηλαδή των σταθερών λύσεων του συστήματος.

Αρκεί να λύσουμε το εξής σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων

$$\begin{cases} f(p,q) = p(1-q) = 0, \\ g(p,q) = zq(p-1) = 0. \end{cases} \quad (3.24)$$

Οι λύσεις του παραπάνω συστήματος είναι $(\bar{p}, \bar{q}) = (0, 0)$ ή $(\bar{p}, \bar{q}) = (1, 1)$, που αποτελούν και τα μοναδικά σημεία ισορροπίας του συστήματος (3.22).

Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε τα σημεία ισορροπίας ως προς την ευστάθεια. Θέτουμε $p = \bar{p} + \theta_1$ και $q = \bar{q} + \theta_2$ και, γραμμικοποιώντας τις εξισώσεις (θεωρώντας τους μη γραμμικούς όρους $\theta_1\theta_2$ αμελητέους), για $|\theta_i| \ll 1$, $i = 1, 2$, καταλήγουμε στο εξής σύστημα διαταραχών

$$\begin{pmatrix} \theta'_1(t) \\ \theta'_2(t) \end{pmatrix} \approx J(\bar{p}, \bar{q}) \begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

όπου $J(\bar{p}, \bar{q})$ ο Ιακωβιανός πίνακας των f, g στο σημείο ισορροπίας $(\bar{p}, \bar{q})$. Για το σύστημά μας, τα σημεία ισορροπίας είναι τα $(\bar{p}, \bar{q}) = (0, 0)$ ή $(\bar{p}, \bar{q}) = (1, 1)$, και ο Ιακωβιανός πίνακας των f, g είναι

$$J(p, q) = \begin{pmatrix} 1-q & -p \\ zq & zp-z \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Άρα, οι δύο ιδιοτιμές για το σημείο ισορροπίας $(0, 0)$ προκύπτουν λύνοντας την αλγεβρική εξίσωση

$$\det(J(0, 0) - \lambda I_2) = \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -z-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)(-z-\lambda) = 0. \quad (3.27)$$

Επομένως, οι δύο ιδιοτιμές του πίνακα $J(0, 0)$ είναι $\lambda_1 = 1$ και $\lambda_2 = -z$. Εφόσον οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές και ετερόσημες, το σημείο ισορροπίας είναι ασταθές σάγμα. Η διαταραχή γύρω από το σημείο ισορροπίας $(0, 0)$ είναι

$$\begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix} = \mathbf{m}e^t + \mathbf{w}e^{-zt}. \quad (3.28)$$

- Κατά μήκος του άξονα που είναι παράλληλος στο ιδιοδιάνυσμα $\mathbf{m}$ και αντιστοιχεί στη θετική ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1$, η διαταραχή αποκλίνει εκθετικά από το σημείο ισορροπίας $(0, 0)$.
- Κατά μήκος του άξονα που είναι παράλληλος στο ιδιοδιάνυσμα $\mathbf{w}$ και αντιστοιχεί στην αρνητική ιδιοτιμή $\lambda_2 = -z$, η διαταραχή συγκλίνει εκθετικά στο σημείο ισορροπίας $(0, 0)$.

Υπολογίζουμε τις ιδιοτιμές του πίνακα J στο σημείο ισορροπίας $(1, 1)$, όπου έχουμε

$$\det(J(1, 1) - \lambda I_2) = \begin{vmatrix} -\lambda & -1 \\ z & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + z = 0. \quad (3.29)$$

Επομένως, οι δύο ιδιοτιμές του πίνακα $J(1, 1)$ είναι οι $\lambda = \pm i\sqrt{z}$ και, αφού οι ιδιοτιμές είναι φανταστικές, το σημείο ισορροπίας είναι ευσταθές κέντρο. Η διαταραχή γύρω από το σημείο ισορροπίας $(1, 1)$ είναι

$$\begin{pmatrix} \theta_1(t) \\ \theta_2(t) \end{pmatrix} = \mathbf{m}e^{i\sqrt{z}t} + \mathbf{w}e^{-i\sqrt{z}t}. \quad (3.30)$$

Άρα, οι συνιστώσες των λύσεων θ_1, θ_2 είναι περιοδικές γύρω από το σημείο ισορροπίας $(1, 1)$ με περίοδο $T = \frac{2\pi}{\sqrt{z}}$ και ο χώρος φάσεων γύρω του αποτελείται από κλειστές τροχιές.

Για να έχουμε μια οπτική για το πώς συμπεριφέρονται οι λύσεις (p, q) απομακρυσμένα από τα σημεία ισορροπίας, πρέπει να εξετάσουμε αν υπάρχει κάποια διατηρητέα ποσότητα για το σύστημα (3.22). Διαιρώντας τη δεύτερη εξίσωση με την πρώτη, και θεωρώντας ότι $(p, q) \neq \{(0, 0), (1, 1)\}$, καταλήγουμε σε μια διαφορική εξίσωση χωριζομένων μεταβλητών

$$\frac{1-q}{q} dq = \frac{z(p-1)}{p} dp. \quad (3.31)$$

Ολοκληρώνοντας την παραπάνω σχέση, έχουμε

$$\int \left(\frac{1}{q} - 1 \right) dq = z \int \left(1 - \frac{1}{p} \right) dp, \quad (3.32)$$

και καταλήγουμε στη σχέση

$$H(p, q) = zp + q - \ln(p^z q) = c, \quad (p, q) \in (0, \infty) \times (0, \infty) \setminus \{(1, 1)\}, \quad (3.33)$$

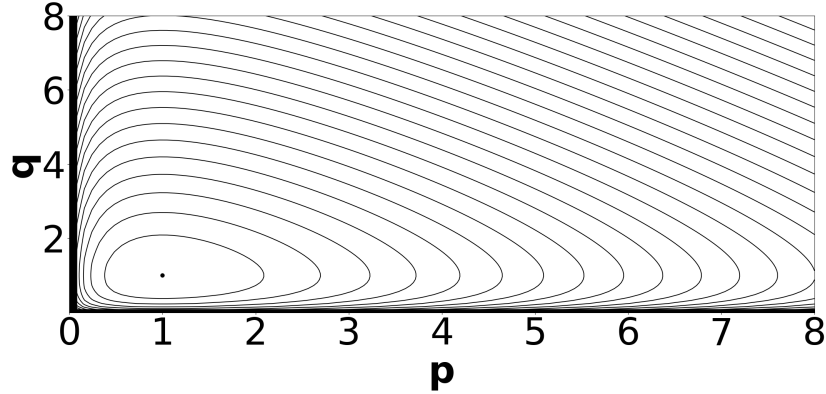
όπου c είναι αυθαίρετη σταθερά.

Η συνάρτηση $H(p, q)$ είναι διατηρητέα ως προς το χρόνο, δηλαδή

$$\frac{dH}{d\tau} = 0. \quad (3.34)$$

Το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (3.22) διαθέτει την ποσότητα $H(p, q)$, που δίνεται από την εξίσωση (3.33). Το γεγονός αυτό επιτρέπει να χαρακτηριστεί ως Χαμιλτονιανό σύστημα υπό μια γενικευμένη έννοια. Αν και δεν προέρχεται από έναν τυπικό Χαμιλτονιανό με κανονικές μεταβλητές (p, q) , υπάρχει μια μη-κανονική δομή *Poisson*, μέσω της οποίας μπορεί να διατυπωθεί το σύστημα ως Χαμιλτονιανό. Σε αυτή τη δομή, η διατηρητέα ποσότητα $H(p, q)$ παίζει τον ρόλο της Χαμιλτονιανής συνάρτησης, ενώ το σύστημα διαθέτει αντισυμμετρική *Poisson* δομή που διασφαλίζει την ολική ολοκληρωσιμότητά του, καθώς κάθε τροχιά βρίσκεται πάνω σε καμπύλη στάθμης της H .

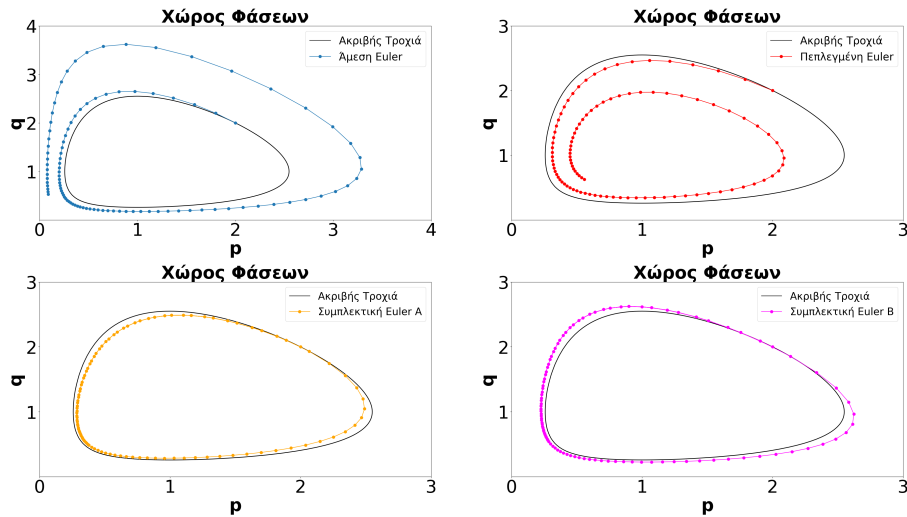
Μια αναλυτική παρουσίαση τέτοιων μη τυπικών (μη κανονικών) *Poisson* δομών, καθώς και των εφαρμογών τους σε συστήματα όπως το *Lotka–Volterra*, δίνεται στο βιβλίο των Laurent-Gengoux, Pichereau και Vanhaecke [8].



Σχήμα 3.5: Γραφική παράσταση του χώρου φάσεων (p, q) που απεικονίζει τις καμπύλες στάθμης της διατηρητέας ποσότητας H , για την περίπτωση $z = 1$.

3.2.1 Εφαρμογή Αριθμητικών Μεθόδων

Εφαρμόζουμε τις δύο μη συμπλεκτικές αριθμητικές μεθόδους, την άμεση και την πεπλεγμένη Euler, καθώς και τις συμπλεκτικές μεθόδους Euler, για να επιλύσουμε αριθμητικά το σύστημα διαφορικών εξισώσεων (3.22). Παριστάνουμε γραφικά



Σχήμα 3.6: Λύσεις των αδιάστατων εξισώσεων Lotka-Volterra (3.22) με βήμα χρόνου $h = 0.1$ για το πρόβλημα αρχικών τιμών $(p(0), q(0)) = (2, 2)$ και $z = 1$ χρησιμοποιώντας τις τέσσερις αριθμητικές μεθόδους στο διάστημα χρόνου $[0, 10]$.

Παρατήρηση: Οι μη συμπλεκτικές μέθοδοι Euler παράγουν σπειροειδείς τροχιές με λανθασμένη ταλάντωση. Οι συμπλεκτικές, αντίθετα, διατηρούν σταθερό πλάτος και προσεγγίζουν σωστά την ακριβή λύση.

Παρακάτω παρουσιάζουμε αριθμητικά αποτελέσματα των συμπλεκτικών αριθμητικών μεθόδων Euler, Störmer–Verlet, της πεπλεγμένης μεθόδου του μέσου και της Gauss–Legendre για το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής (3.33) για το σύστημα (3.22) με αρχική συνθήκη $(p(0), q(0)) = (2, 2)$ σε ένα μεγαλύτερο χρονικό διάστημα $[0, 100]$

Πίνακας 3.8: Συμπλεκτική Euler A

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$8.872005e - 02$	0.917
–	0.050000	$4.698356e - 02$	0.956
–	0.025000	$2.421831e - 02$	0.977
–	0.012500	$1.230091e - 02$	0.988
–	0.006250	$6.199754e - 03$	0.994
–	0.003125	$3.112378e - 03$	-

Πίνακας 3.9: Συμπλεκτική Euler B

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$1.154261e - 01$	1.108
–	0.050000	$5.352129e - 02$	1.050
–	0.025000	$2.584439e - 02$	1.024
–	0.012500	$1.270692e - 02$	1.011
–	0.006250	$6.301223e - 03$	1.005
–	0.003125	$3.137744e - 03$	-

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδιπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας τη θεωρητική τάξη σύγκλισης κάθε μεθόδου, που είναι ένα.

Πίνακας 3.10: Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$3.232362e - 03$	2.001
—	0.050000	$8.070398e - 04$	2.000
—	0.025000	$2.016943e - 04$	2.000
—	0.012500	$5.041946e - 05$	2.000
—	0.006250	$1.260460e - 05$	2.000
—	0.003125	$3.151132e - 06$	-

Πίνακας 3.11: Störmer-Verlet A

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$3.135562e - 03$	2.010
—	0.050000	$7.781364e - 04$	2.002
—	0.025000	$1.941783e - 04$	2.000
—	0.012500	$4.852239e - 05$	2.000
—	0.006250	$1.212931e - 05$	2.000
—	0.003125	$3.032233e - 06$	-

Πίνακας 3.12: Störmer-Verlet B

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$3.135582e - 03$	2.010
—	0.050000	$7.781286e - 04$	2.002
—	0.025000	$1.941784e - 04$	2.000
—	0.012500	$4.852242e - 05$	2.000
—	0.006250	$1.212921e - 05$	2.000
—	0.003125	$3.032216e - 06$	-

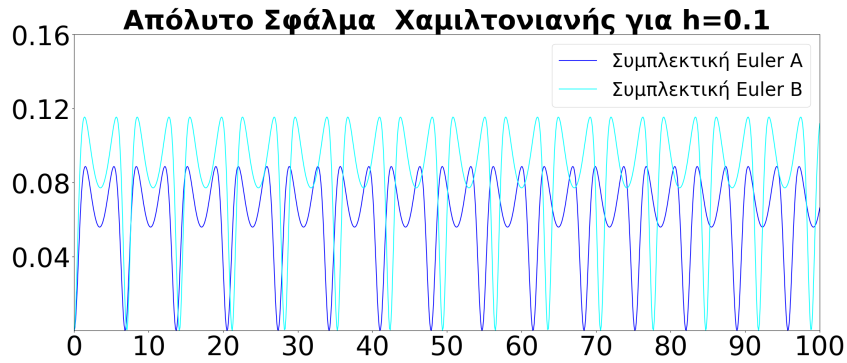
Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποτετραπλασιάζεται, γεγονός που επιβεβαιώνει ότι η τάξη σύγκλισης κάθε μεθόδου είναι δύο.

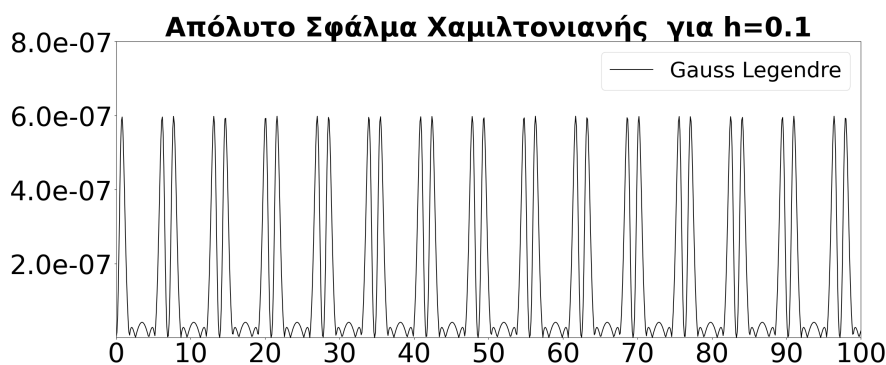
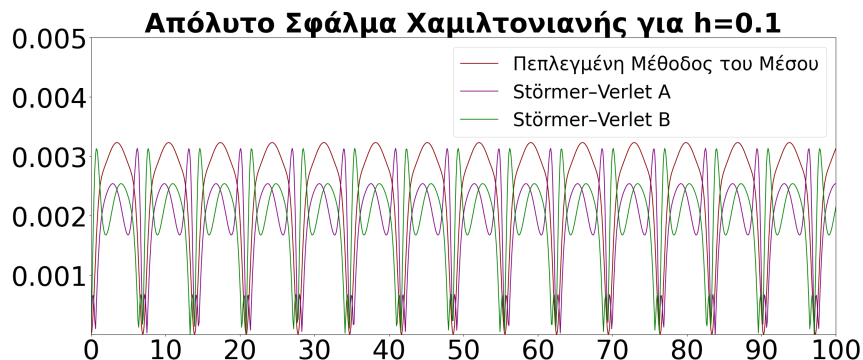
Πίνακας 3.13: Gauss–Legendre

z	h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC
1	0.100000	$5.982720e - 07$	4.002
–	0.050000	$3.732114e - 08$	4.000
–	0.025000	$2.331268e - 09$	4.000
–	0.012500	$1.456923e - 10$	3.999
–	0.006250	$9.110934e - 12$	4.018
–	0.003125	$5.622169e - 13$	-

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδεκαεξαπλασιάζεται, γεγονός που επιβεβαιώνει ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου είναι τέσσερα.

Παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις της απόλυτης τιμής του σφάλματος της Χαμιλτονιανής στο χρονικό διάστημα $[0, 100]$, με αρχική συνθήκη $(p(0), q(0)) = (2, 2)$ και παράμετρο $z = 1$, για τις έξι συμπλεκτικές μεθόδους





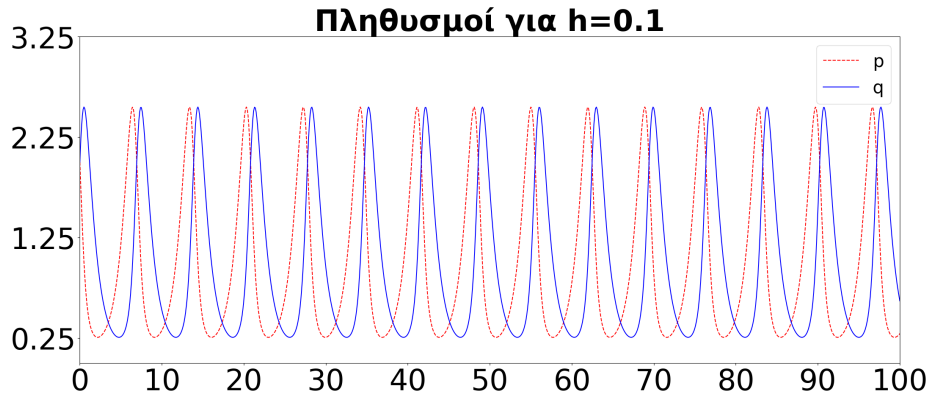
Παρατήρηση: Η ψευδοπεριοδικότητα του σφάλματος αναδεικνύει τη γεωμετρική ευστάθεια και την ακρίβεια των συμπλεκτικών μεθόδων, διατηρώντας τη μακροχρόνια αξιοπιστία χωρίς συσσώρευση σφάλματος στο διάστημα $[0, 100]$.

Το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής με $h = 0.1$ για κάθε μέθοδο είναι

Συμπλεκτική Euler A	$8.872005e - 02$
Συμπλεκτική Euler B	$1.154261e - 01$
Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου	$3.232362e - 03$
Störmer-Verlet A	$3.135562e - 03$
Störmer-Verlet B	$3.135582e - 03$
Gauss-Legendre	$5.982720e - 07$

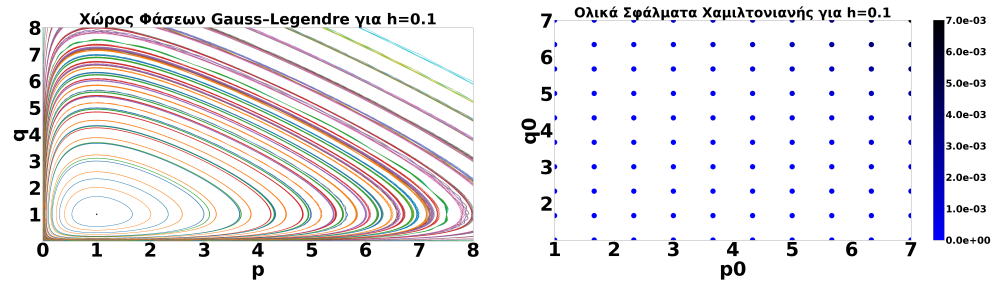
Πίνακας 3.14: Η συμπλεκτική αριθμητική μέθοδος Gauss-Legendre παρουσιάζει μεγαλύτερη αριθμητική ακρίβεια, καθώς το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής είναι μικρότερο.

Παρουσιάζουμε παρακάτω την εξέλιξη των πληθυσμών για το ίδιο πρόβλημα αρχικών τιμών, με την αριθμητική μέθοδο Gauss-Legendre υψηλότερης τάξης (τέσσερα) στο διάστημα χρόνου $[0, 100]$



Σχήμα 3.7: Οι αριθμητικές λύσεις είναι ταλαντωτικές με το χρόνο, γεγονός που επιβεβαιώνει τη σωστή ποιοτική συμπεριφορά του συστήματος.

Παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις του χώρου φάσεων για 100 προβλήματα αρχικών τιμών, με τις αρχικές τους συνθήκες να ανήκουν σε ομοιόμορφο πλέγμα με βήμα $k \approx 0.06$ στο τετράγωνο $[1, 7] \times [1, 7]$, χρησιμοποιώντας την αριθμητική μέθοδο Gauss-Legendre υψηλότερης τάξης (τέσσερα) στο διάστημα χρόνου $[0, 100]$.



Σχήμα 3.8: Παρατηρούμε ότι το μέγιστο ολικό σφάλμα της μεθόδου Gauss-Legendre είναι της τάξης του $e-03$ στο αριστερό σχήμα, επιβεβαιώνοντας την ακρίβειά της στο πρόβλημα του εκκρεμούς. Ο αριθμητικός χώρος φάσης προσεγγίζει ικανοποιητικά τον ακριβή, όπως φαίνεται στο δεξί σχήμα.

3.3 Πρόβλημα Kepler Δύο Σωμάτων

Το τελευταίο Χαμιλτονιανό πρόβλημα που θα μελετήσουμε αφορά τον υπολογισμό της κίνησης δύο σωμάτων που έλκουν το ένα το άλλο. Επιλέγουμε το ένα από τα σώματα ως το κέντρο του συστήματος συντεταγμένων. Η κίνηση τότε παραμένει σε ένα επίπεδο και μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δισδιάστατες συντεταγμένες (q_1, q_2) για τη θέση του δεύτερου σώματος. Ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα, με κατάλληλη κανονικοποίηση, οδηγεί στο εξής σύστημα διαφορικών εξισώσεων δεύτερης τάξης

$$q_1'' = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \quad q_2'' = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}. \quad (3.35)$$

Θεωρούμε $(q_1', q_2') = (p_1, p_2)$, οπότε οι εξισώσεις κίνησης του δεύτερου σώματος περιγράφονται από το σύστημα των τεσσάρων διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης

$$\begin{cases} q_1' = p_1, \\ q_2' = p_2, \\ p_1' = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \\ p_2' = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}. \end{cases} \quad (3.36)$$

Θα αποδείξουμε ότι το σύστημά μας είναι Χαμιλτονιανό και περιγράφεται από τις διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης στη σχέση (3.36). Πολλαπλασιάζοντας την αριστερή διαφορική εξίσωση της σχέσης (3.35) με την πρώτη συνιστώσα της ταχύτητας, q_1' , και ολοκληρώνοντας, καταλήγουμε στο εξής

$$H_1(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}p_1^2 - \frac{1}{2\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} = \text{σταθερή}. \quad (3.37)$$

Με παρόμοιο τρόπο, πολλαπλασιάζουμε τη δεξιά διαφορική εξίσωση της σχέσης (3.35) με τη δεύτερη συνιστώσα της ταχύτητας, q_2' , και ολοκληρώνοντας καταλήγουμε στο εξής

$$H_2(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}p_2^2 - \frac{1}{2\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} = \text{σταθερή}. \quad (3.38)$$

Προσθέτοντας τις σχέσεις (3.37) και (3.38), καταλήγουμε στη Χαμιλτονιανή

$$H(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}, \quad (p_1, p_2, q_1, q_2) \in \mathbb{R}^2 \times (\mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}), \quad (3.39)$$

η οποία είναι σταθερή στο χρόνο, και επειδή

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = q'_i, \quad \text{και} \quad -\frac{\partial H}{\partial q_i} = p'_i, \quad i = 1, 2, \quad (3.40)$$

τότε το σύστημα διαφορικών εξισώσεων στη σχέση (3.36) είναι Χαμιλτονιανό. Εκτός από τη Χαμιλτονιανή (ενέργεια) H , υπάρχει και μία δεύτερη διατηρητέα ποσότητα, η στροφορμή L , η οποία ορίζεται ως

$$L(p_1, p_2, q_1, q_2) = (q_1, q_2) \times (p_1, p_2) = \begin{vmatrix} q_1 & q_2 \\ p_1 & p_2 \end{vmatrix} = q_1 p_2 - q_2 p_1. \quad (3.41)$$

Θα αποδείξουμε ότι η στροφορμή είναι διατηρητέα ποσότητα. Παραγωγίζοντας ως προς το χρόνο, έχουμε

$$\frac{dL}{dt} = q'_1 p_2 + q_1 p'_2 - q'_2 p_1 - q_2 p'_1, \quad (3.42)$$

Και από τις διαφορικές εξισώσεις στη σχέση (3.36) καταλήγουμε

$$\frac{dL}{dt} = p_1 p_2 - \frac{q_1 q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}} - p_2 p_1 + \frac{q_2 q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}} = 0, \quad (3.43)$$

άρα η στροφορμή είναι δεύτερη διατηρητέα ποσότητα του συστήματος.

Η διατήρηση της Χαμιλτονιανής και της στροφορμής αποτελεί θεμελιώδες χαρακτηριστικό του προβλήματος του Kepler. Ωστόσο, κατά την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης, οι κλασικές μέθοδοι ολοκλήρωσης ενδέχεται να μη διατηρούν αυτές τις ποσότητες. Για τον λόγο αυτό, η χρήση εξειδικευμένων μεθόδων ολοκλήρωσης που σέβονται τη γεωμετρική δομή του συστήματος είναι απαραίτητη. Οι συμπλεκτικές μέθοδοι έχουν την ιδιότητα να διατηρούν τη συμπλεκτική δομή και συχνά προσεγγίζουν καλύτερα τις διατηρητέες ποσότητες του συστήματος, ακόμα και σε μεγάλα χρονικά διαστήματα ολοκλήρωσης. Στην επόμενη υποενότητα εξετάζουμε και συγκρίνουμε αριθμητικά αποτελέσματα των συμπλεκτικών μεθόδων ως προς τη διατήρηση της ενέργειας και της Χαμιλτονιανής στο πρόβλημα του Kepler.

3.3.1 Εφαρμογή Αριθμητικών Συμπλεκτικών Μεθόδων

Παρακάτω παρουσιάζουμε αριθμητικά αποτελέσματα των συμπλεκτικών αριθμητικών μεθόδων Euler, Störmer–Verlet, πεπλεγμένης μεθόδου του μέσου και Gauss–Legendre για το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής (3.39) και το ολικό σφάλμα της στροφορμής (3.41), θεωρώντας το πρόβλημα αρχικών τιμών που περιγράφεται από τη σχέση (3.36) με αρχική συνθήκη $(p_1(0), p_2(0), q_1(0), q_2(0)) = (1, 1, 1, 0)$ στο διάστημα χρόνου $[0, 100]$

Πίνακας 3.15: Συμπλεκτική Euler A

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$7.553140e - 02$	0.930	$3.663736e - 15$
0.050000	$3.963829e - 02$	0.966	$1.554312e - 15$
0.025000	$2.028183e - 02$	0.983	$5.551115e - 15$
0.012500	$1.025629e - 02$	0.991	$5.551115e - 15$
0.006250	$5.156846e - 03$	0.996	$5.107026e - 15$
0.003125	$2.585568e - 03$	-	$5.773160e - 15$

Πίνακας 3.16: Συμπλεκτική Euler B

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$8.990873e - 02$	1.055	$4.884981e - 15$
0.050000	$4.327266e - 02$	1.029	$3.552714e - 15$
0.025000	$2.119520e - 02$	1.015	$3.774758e - 15$
0.012500	$1.048473e - 02$	1.007	$8.659740e - 15$
0.006250	$5.213942e - 03$	1.003	$5.329071e - 15$
0.003125	$2.599857e - 03$	-	$9.325873e - 15$

Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδιπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας ότι η τάξη σύγκλισης των μεθόδων είναι ένα, ενώ το σφάλμα στη στροφορμή L παραμένει εξαιρετικά μικρό χάρη στη συμπλεκτικότητα της μεθόδου.

Πίνακας 3.17: Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$1.175729e - 02$	2.057	$1.436697e - 10$
0.050000	$2.825060e - 03$	2.013	$1.474757e - 10$
0.025000	$6.997418e - 04$	2.003	$3.938738e - 12$
0.012500	$1.745237e - 04$	2.001	$9.710011e - 13$
0.006250	$4.360545e - 05$	2.000	$4.001244e - 13$
0.003125	$1.089976e - 05$	-	$3.270717e - 13$

Πίνακας 3.18: Störmer-Verlet A

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$1.023550e - 02$	1.973	$2.886580e - 15$
0.050000	$2.607356e - 03$	1.993	$3.108624e - 15$
0.025000	$6.548310e - 04$	1.998	$5.773160e - 15$
0.012500	$1.638841e - 04$	2.000	$7.105427e - 15$
0.006250	$4.098482e - 05$	2.000	$1.221245e - 14$
0.003125	$1.024705e - 05$	-	$2.620126e - 14$

Πίνακας 3.19: Störmer-Verlet B

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$1.708787e - 03$	1.994	$1.887379e - 15$
0.050000	$4.288903e - 04$	1.998	$4.376499e - 13$
0.025000	$1.073573e - 04$	1.999	$1.108225e - 12$
0.012500	$2.684628e - 05$	2.000	$1.274758e - 12$
0.006250	$6.712069e - 06$	2.000	$1.219913e - 12$
0.003125	$1.678050e - 06$	-	$6.652456e - 13$

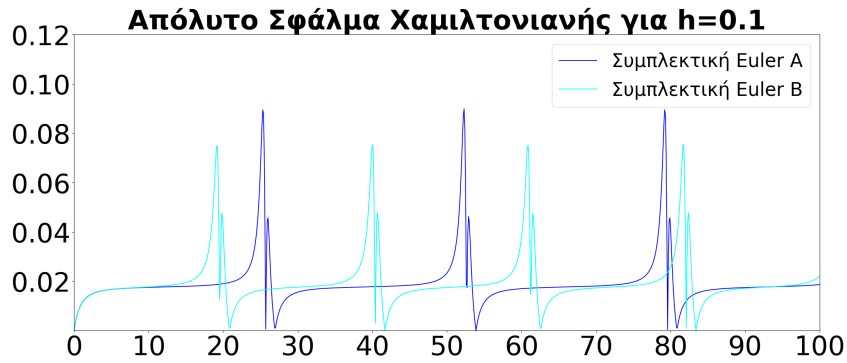
Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποτετραπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας την τάξη σύγκλισης των μεθόδων, που είναι δύο, ενώ το σφάλμα στη στροφορμή L παραμένει εξαιρετικά μικρό χάρη στη συμπλεκτικότητα της μεθόδου.

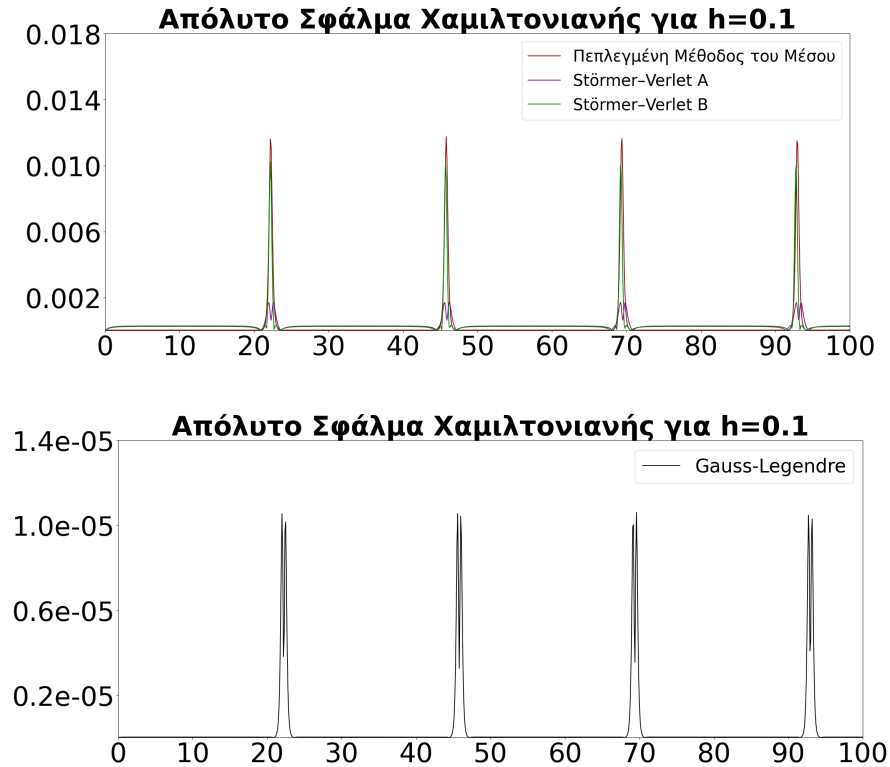
Πίνακας 3.20: Gauss–Legendre

h	$\max_{1 \leq n \leq N} H_n - H(t_n) $	EOC Ενέργειας	$\max_{1 \leq n \leq N} L_n - L(t_n) $
0.100000	$1.061768e - 05$	4.009	$1.887379e - 15$
0.050000	$6.593041e - 07$	4.002	$2.442491e - 15$
0.025000	$4.115210e - 08$	4.001	$3.108624e - 15$
0.012500	$2.570990e - 09$	4.000	$5.995204e - 15$
0.006250	$1.606744e - 10$	3.999	$6.994405e - 15$
0.003125	$1.004730e - 11$	—	$1.021405e - 14$

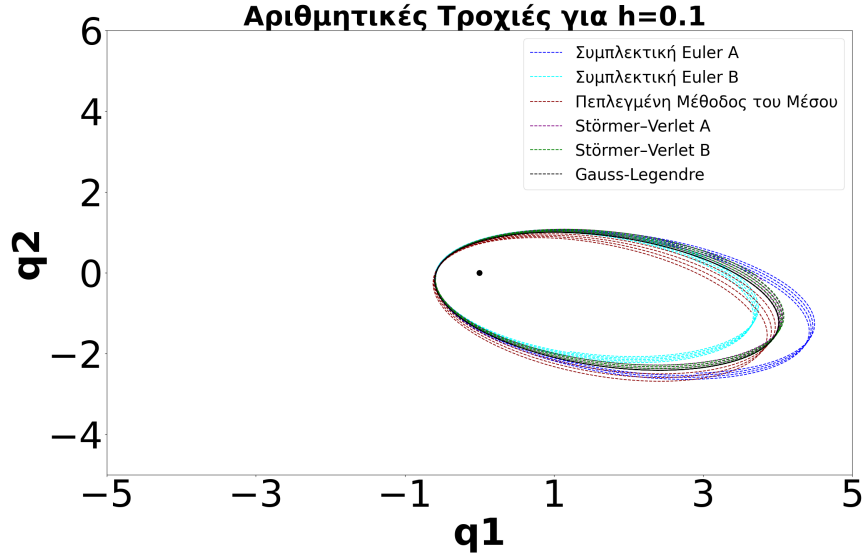
Παρατήρηση: Με κάθε υποδιπλασιασμό του βήματος χρόνου $h > 0$, το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής H περίπου υποδεκαεξαπλασιάζεται, επιβεβαιώνοντας την τάξη σύγκλισης της μεθόδου που είναι τέσσερα, ενώ το σφάλμα στη στροφορμή L παραμένει εξαιρετικά μικρό χάρη στη συμπλεκτικότητα της μεθόδου.

Παρακάτω παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις της απόλυτης τιμής του σφάλματος της Χαμιλτονιανής στο χρονικό διάστημα $[0, 100]$ για το ίδιο πρόβλημα αρχικών τιμών, όπως υπολογίστηκε με τις συμπλεκτικές μεθόδους





Παρατήρηση: Η ψευδοπεριοδικότητα του απόλυτου σφάλματος της Χαμιλτονιανής H καταδεικνύει ότι οι συμπλεκτικές αριθμητικές μέθοδοι είναι αξιόπιστες, καθώς παρέχουν σωστά και ακριβή αποτελέσματα και χαρακτηρίζονται από γεωμετρική ευστάθεια, διατηρώντας το σφάλμα χωρίς αριθμητικές συσσωρεύσεις σε μεγάλο χρονικό διάστημα, όπως στο $[0, 100]$.



Το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής με $h = 0.1$ για κάθε μέθοδο είναι

Συμπλεκτική Euler A	$8.990873e - 02$
Συμπλεκτική Euler B	$7.553140e - 02$
Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου	$1.175729e - 02$
Störmer-Verlet A	$1.708787e - 03$
Störmer-Verlet B	$1.023550e - 02$
Gauss-Legendre	$1.061769e - 05$

Πίνακας 3.21: Η συμπλεκτική αριθμητική μέθοδος Gauss-Legendre παρουσιάζει μεγαλύτερη αριθμητική ακρίβεια, καθώς το ολικό σφάλμα της Χαμιλτονιανής είναι μικρότερο.

Συμπεράσματα

Από τη μελέτη προέκυψε ότι οι συμπλεκτικές μέθοδοι, ιδιαίτερα η μέθοδος Gauss-Legendre τέταρτης τάξης, προσφέρουν υψηλή ακρίβεια και γεωμετρική ευστάθεια σε μακροχρόνιες προσομοιώσεις Χαμιλτονιανών συστημάτων. Τα αριθμητικά αποτελέσματα επιβεβαιώνουν τη θεωρητική σύγκλιση και τη διατήρηση φυσικών μεγεθών, όπως της Χαμιλτονιανής και της στροφορμής, με εξαιρετικά μικρά σφάλματα. Συνεπώς, αυτές οι μέθοδοι είναι κατάλληλες και αξιόπιστες για την αριθμητική επίλυση Χαμιλτονιανών προβλημάτων.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Κώδικες

Παρακάτω παρουσιάζουμε τους κώδικες σε γλώσσα προγραμματισμού Python που χρησιμοποιήσαμε για την υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων.

Άμεση Euler

```
def Exp_Euler(f, t0, T, y0, N):  
    tnodes = np.linspace(t0, T, N+1) # χρονικοί κόμβοι  
    h = tnodes[1] - tnodes[0]        # χρονικό βήμα  
    yn = np.array(y0)                 # αρχική κατάσταση  
    yvals = [[v] for v in yn]         # λίστα για τιμές λύσης  
    for i in range(N):  
        yn = yn + h * f(tnodes[i], yn) # βήμα Euler  
        for j in range(len(yn)):  
            yvals[j].append(yn[j])      # αποθήκευση νέων τιμών  
    return tnodes, np.array(yvals)     # επιστροφή χρόνων και λύσης
```

Πεπλεγμένη Euler

```
def Imp_Euler(f, t0, T, y0, N):  
    def F(x, tnew, yold, f, h):  
        return x - yold - h * f(tnew, x) # Μη γραμμική εξίσωση  
                                           # για  $y_{n+1}$   
  
    tnodes = np.linspace(t0, T, N+1) # Διακριτοί χρονικοί κόμβοι  
    h = tnodes[1] - tnodes[0]        # Χρονικό βήμα  
    yn = np.array(y0)                 # Αρχική συνθήκη  
    yvals = [[v] for v in yn]         # Αποθήκευση λύσης  
  
    for i in range(N):
```

Κεφάλαιο 3

```
yn = fsolve(F, yn, (tnodes[i+1], yn, f, h))# Λύνει  $F(x) = 0$ 
for j in range(len(yn)):
    yvals[j].append(yn[j])          # Αποθήκευση τιμών

return tnodes, np.array(yvals)      # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Συμπλεκτική Euler A

```
import numpy as np                # Εισαγωγή της βιβλιοθήκης NumPy
from scipy.optimize import fsolve # Συνάρτηση επίλυσης μη-γραμμικών εξισώσεων

def symplectic_euler_A(f, g, t0, T, y0, N):
    tnodes = np.linspace(t0, T, N + 1) # Δημιουργεί ισαπέχοντα χρονικά σημεία
    h = tnodes[1] - tnodes[0]          # Υπολογίζει το χρονικό βήμα

    yn = np.array(y0)                  # Αρχική κατάσταση ως πίνακας
    d = len(yn) // 2                   # Διάσταση του διανύσματος θέσης (q)

    q = yn[:d]                          # Αρχικές θέσεις
    p = yn[d:]                          # Αρχικές ορμές

    qvals = [[v] for v in q]           # Λίστες για τις θέσεις στο χρόνο
    pvals = [[v] for v in p]           # Λίστες για τις ορμές στο χρόνο

    for i in range(N):                  # Βρόχος ανά χρονικό βήμα
        def G(pnext):                  # Συνάρτηση για implicit επίλυση της ορμής
            return pnext - p - h * g(q, pnext)

        p_next = fsolve(G, p)           # Λύνει για  $p_{n+1}$ 
        q_next = q + h * f(q, p_next)   # Υπολογίζει  $q_{n+1}$ 

        q = q_next                      # Ενημέρωση q
        p = p_next                      # Ενημέρωση p

        for j in range(d):              # Αποθήκευση νέας τιμής q
            qvals[j].append(q[j])
        for j in range(d):              # Αποθήκευση νέας τιμής p
            pvals[j].append(p[j])

    yvals = np.array(qvals + pvals)     # Συνένωση q και p
    return tnodes, yvals                # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Συμπλεκτική Euler B

```
import numpy as np                # Βιβλιοθήκη για υπολογισμούς με πίνακες
from scipy.optimize import fsolve # Λύνει μη-γραμμικές εξισώσεις

def symplectic_euler_B(f, g, t0, T, y0, N):
    tnodes = np.linspace(t0, T, N + 1) # Ισαπέχοντα χρονικά σημεία
    h = tnodes[1] - tnodes[0]          # Βήμα χρόνου

    yn = np.array(y0)                  # Αρχική συνθήκη ως πίνακας
    d = len(yn) // 2                   # Διάσταση των q και p
```

Κεφάλαιο 3

```
q = yn[:d] # Αρχικές θέσεις
p = yn[d:] # Αρχικές ορμές

qvals = [[v] for v in q] # Αποθήκευση θέσεων
pvals = [[v] for v in p] # Αποθήκευση ορμών

for i in range(N): # Επανάληψη για κάθε βήμα
    def G(qnext): # Εξίσωση για  $q_{n+1}$ 
        return qnext - q - h * f(qnext, p) # Implicit βήμα για θέση

    q_next = fsolve(G, q) # Εύρεση  $q_{n+1}$ 
    p_next = p + h * g(q_next, p) # Τπολογισμός  $p_{n+1}$ 

    q = q_next # Ενημέρωση θέσης
    p = p_next # Ενημέρωση ορμής

    for j in range(d): # Ενημέρωση λιστών q, p
        qvals[j].append(q[j])
        pvals[j].append(p[j])

yvals = np.array(qvals + pvals) # Συνένωση q και p
return tnodes, yvals # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

```
import numpy as np # Αριθμητικοί υπολογισμοί
from scipy.optimize import fsolve # Λύση μη-γραμμικών συστημάτων

def implicit_midpoint(f, t0, T, y0, N):
    tnodes = np.linspace(t0, T, N + 1) # Χρονικά σημεία
    h = tnodes[1] - tnodes[0] # Βήμα χρόνου

    yn = np.array(y0) # Αρχική τιμή
    yvals = [[v] for v in yn] # Αποθήκευση λύσης

    for i in range(N): # Βρόχος επανάληψης
        def G(ynew): # Εξίσωση για  $y_{n+1}$ 
            ymid = 0.5 * (yn + ynew) # Μέσο σημείο
            return ynew - yn - h * f(ymid) # Σχήμα midpoint

        y_next = fsolve(G, yn) # Λύνει το  $G = 0$ 
        yn = y_next # Ενημέρωση λύσης

        for j in range(len(yn)): # Καταχώρηση λύσης
            yvals[j].append(yn[j])

    return tnodes, np.array(yvals) # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Κεφάλαιο 3

Störmer-Verlet A

```
import numpy as np                                # Πίνακες & αριθμητικοί υπολογισμοί

def stormer_verlet_A(f, g, t0, T, y0, N):
    tnodes = np.linspace(t0, T, N + 1)           # Χρονικά σημεία
    h = tnodes[1] - tnodes[0]                   # Βήμα χρόνου

    y0 = np.array(y0)                           # Αρχική συνθήκη ως πίνακας
    d = len(y0) // 2                             # Διάσταση q, p
    q = y0[:d]                                    # Αρχικές θέσεις
    p = y0[d:]                                    # Αρχικές ορμές

    qvals = [[v] for v in q]                    # Αποθήκευση θέσεων
    pvals = [[v] for v in p]                    # Αποθήκευση ορμών

    for n in range(N):
        p_half = p + 0.5 * h * g(q, p)          # Βρόχος βημάτων
        q_next = q + h * f(q, p_half)           # Ενδιάμεση ορμή
        p_next = p_half + 0.5 * h * g(q_next, p_half) # Τελική ορμή

        q, p = q_next, p_next                   # Ενημέρωση μεταβλητών

        for i in range(d):                      # Ενημέρωση λιστών
            qvals[i].append(q[i])
            pvals[i].append(p[i])

    yvals = np.array(qvals + pvals)             # Συνένωση q και p
    return tnodes, yvals                        # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Störmer-Verlet B

```
import numpy as np                                # Βιβλιοθήκη πίνακες/υπολογισμοί

def stormer_verlet_B(f, g, t0, T, y0, N):
    tnodes = np.linspace(t0, T, N + 1)           # Χρονικά σημεία
    h = tnodes[1] - tnodes[0]                   # Βήμα χρόνου

    y0 = np.array(y0)                           # Αρχική συνθήκη
    d = len(y0) // 2                             # Διάσταση q, p
    q = y0[:d]                                    # Αρχικές θέσεις
    p = y0[d:]                                    # Αρχικές ορμές

    qvals = [[v] for v in q]                    # Αποθήκευση θέσεων
    pvals = [[v] for v in p]                    # Αποθήκευση ορμών

    for n in range(N):
        q_half = q + 0.5 * h * f(q, p)          # Βρόχος βημάτων
        p_next = p + h * g(q_half, p)           # Ενδιάμεση θέση
        q_next = q_half + 0.5 * h * f(q_half, p_next) # Επόμενη ορμή
        p_next = p_next + h * g(q_half, p_next) # Τελική θέση

        q, p = q_next, p_next                   # Ενημέρωση μεταβλητών

        for i in range(d):                      # Ενημέρωση λιστών
```

Κεφάλαιο 3

```
        qvals[i].append(q[i])
        pvals[i].append(p[i])

yvals = np.array(qvals + pvals)      # Συνένωση q και p
return tnodes, yvals                # Επιστροφή χρόνου και λύσης
```

Gauss-Legendre

```
import numpy as np                    # Εισαγωγή NumPy
from scipy.optimize import fsolve     # fsolve για μη γραμμικά συστήματα

def Gauss_Legendre(f, t0, T, y0, N):
    sqrt3 = np.sqrt(3)
    c1 = 0.5 - sqrt3 / 6              # 1ο στάδιο
    c2 = 0.5 + sqrt3 / 6              # 2ο στάδιο

    a11 = 1/4                         # A[0,0]
    a12 = 1/4 - sqrt3/6               # A[0,1]
    a21 = 1/4 + sqrt3/6               # A[1,0]
    a22 = 1/4                         # A[1,1]

    b1 = 1/2                          # βάρος 1ου σταδίου
    b2 = 1/2                          # βάρος 2ου σταδίου

    tnodes = np.linspace(t0, T, N+1) # σημεία χρόνου
    h = tnodes[1] - tnodes[0]         # βήμα χρόνου

    yn = np.array(y0)                 # αρχική κατάσταση
    yvals = [[v] for v in yn]         # αποθήκευση λύσης

    def F(Z, yold, f, h):
        s = len(y0)                  # μέγεθος συστήματος
        z1 = Z[:s]                   # 1ο στάδιο
        z2 = Z[s:]                   # 2ο στάδιο
        y1 = yold + h * (a11*z1 + a12*z2) # εκτίμηση y1
        y2 = yold + h * (a21*z1 + a22*z2) # εκτίμηση y2
        f1 = f(y1)                   # f(y1)
        f2 = f(y2)                   # f(y2)
        return np.concatenate([z1-f1, z2-f2]) # υπόλοιπο συστήματος

    for i in range(N):
        Z0 = np.concatenate([f(yn), f(yn)]) # κύριος βρόχος
        Z = fsolve(F, Z0, (yn, f, h))        # αρχική προσέγγιση
        s = len(y0)                         # επίλυση
        z1 = Z[:s]                          # διαστάσεις
        z2 = Z[s:]                          # τελικό z1
        yn = yn + h * (b1*z1 + b2*z2)        # τελικό z2
        for j in range(len(yn)):            # επόμενο y
            yvals[j].append(yn[j])          # αποθήκευση

    return tnodes, np.array(yvals)          # επιστροφή
```

Εφαρμογή συμπλεκτικών αριθμητικών μεθόδων σε ένα Π.Α.Τ.

Πριν ορίσουμε τους κώδικες που χρησιμοποιούμε στην Python για ένα Π.Α.Τ. ενός Χαμιλτονιανού συστήματος, θα δώσουμε έναν ορισμό για το Experimental Order of Convergence (EOC).

Ορισμός 5 (Πειραματική Τάξη Σύγκλισης (EOC)). Η πειραματική τάξη σύγκλισης είναι ένα μέτρο που εκτιμά τον ρυθμό με τον οποίο συγκλίνει μια αριθμητική μέθοδος, βασισμένο στα σφάλματα που παρατηρούνται κατά τη μείωση του χρονικού βήματος. Έστω ότι e_{h_1} είναι το σφάλμα της μεθόδου για χρονικό βήμα $h_1 = h$ και e_{h_2} το σφάλμα της μεθόδου για χρονικό βήμα $h_2 = \frac{h}{2}$. Τότε, η πειραματική τάξη σύγκλισης δίνεται από τη σχέση:

$$\text{EOC}(h) = \frac{\log\left(\frac{e_{h_1}}{e_{h_2}}\right)}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}. \quad (3.44)$$

Όταν η αριθμητική μέθοδος είναι συγκλίνουσα, δηλαδή όταν η προσεγγιστική λύση που υπολογίζει πλησιάζει την ακριβή (θεωρητική) λύση του προβλήματος καθώς το $h \rightarrow 0$, τότε η EOC τείνει στη θεωρητική τάξη σύγκλισης p της μεθόδου. Επομένως, ισχύει:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \text{EOC}(h) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\log\left(\frac{e_{h_1}}{e_{h_2}}\right)}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)} = p. \quad (3.45)$$

Τάξης Σύγκλισης Συμπλεκτικής Euler A

```
def f_kepler(q, p): return p # dq/dt = p

def g_kepler(q, p):          # dp/dt = -V
    r = np.sqrt(q[0]**2 + q[1]**2) # r = |q|
    return -q / r**3           # Δύναμη -q / |q|^3

def energy(q1, q2, p1, p2):
```

Κεφάλαιο 3

```

    return 0.5 * (p1**2 + p2**2) - 1 / np.sqrt(q1**2 + q2**2) # Ολική ενέργεια

def angular_momentum(q1, q2, p1, p2):
    return q1 * p2 - q2 * p1 # Στροφορμή ( $q \times p$ )

t0, T = 0, 100 # Αρχικός και τελικός χρόνος
q01, q02 = 1, 1 # Αρχική θέση
p01, p02 = 1, 0 # Αρχική ορμή
y0 = [q01, q02, p01, p02] # Αρχικό διάνυσμα κατάστασης

N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000] # Πλήθη χρονικών βημάτων
errors_energy = np.zeros(len(N_values)) # Πίνακας σφαλμάτων ενέργειας
errors_momentum = np.zeros(len(N_values)) # Πίνακας σφαλμάτων στροφορμής

print("Results for Energy Errors (Symplectic Euler A):") # Τίτλος εξόδου
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N
    tnodes, yvals = symplectic_euler_A(f_kepler, g_kepler, t0, T, y0, N)
    q1, q2 = yvals[0], yvals[1] # θέσεις
    p1, p2 = yvals[2], yvals[3] # ορμές

    energies = energy(q1, q2, p1, p2) # Τπολογισμός ενέργειας
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2) # Τπολογισμός στροφορμής

    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))
    # Μέγιστο σφάλμα ενέργειας
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))
    # Μέγιστο σφάλμα στροφορμής

    h = tnodes[1] - tnodes[0] # Χρονικό βήμα
    print(f"The maximum norm of the energy error for\nh = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}") # Εκτύπωση σφάλματος

print("\nEOC for Energy:") # Τίτλος EOC
for i in range(len(N_values) - 1): # Για κάθε διαδοχικό ζεύγος
    eoc = np.log(errors_energy[i] / errors_energy[i+1])
    / np.log(2) # Τπολογισμός EOC
    print(f"EOC from h={N_values[i]} to h={N_values[i+1]}: {eoc:.6f}") # Εκτύπωση EOC

print("\nResults for Angular Momentum Errors:") # Τίτλος εξόδου
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N
    h = (T - t0) / N # Χρονικό βήμα
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error\nfor h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}") # Εκτύπωση

```

Τάξης Σύγκλισης Συμπλεκτικής Euler B

```

def f_kepler(q, p): return p #  $dq/dt = p$ 

def g_kepler(q, p):
    #  $dp/dt = -V$ 
    r = np.sqrt(q[0]**2 + q[1]**2) #  $r = |q|$ 
    return -q / r**3 # Δύναμη  $-q / |q|^3$ 

def energy(q1, q2, p1, p2):
    return 0.5 * (p1**2 + p2**2) - 1 / np.sqrt(q1**2 + q2**2) # Ολική ενέργεια

```

Κεφάλαιο 3

```
def angular_momentum(q1, q2, p1, p2):  
    return q1 * p2 - q2 * p1          # Στροφορμή ( $q \times p$ )  
  
t0, T = 0, 100                        # Χρονικά όρια  
q01, q02 = 1, 1                      # Αρχική θέση  
p01, p02 = 1, 0                      # Αρχική ορμή  
y0 = [q01, q02, p01, p02]           # Αρχική κατάσταση  
  
N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000] # Πλήθη βημάτων  
errors_energy = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα ενέργειας  
errors_momentum = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα στροφορμής  
  
print("Results for Energy Errors (Symplectic Euler B):") # Τίτλος εξόδου  
for i, N in enumerate(N_values):      # Για κάθε N  
    tnodes, yvals = symplectic_euler_B(f_kepler, g_kepler, t0, T, y0, N)  
    q1, q2 = yvals[0], yvals[1]        # θέσεις  
    p1, p2 = yvals[2], yvals[3]        # ορμές  
  
    energies = energy(q1, q2, p1, p2)   # Υπολογισμός ενέργειας  
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2) # Υπολογισμός στροφορμής  
  
    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))  
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))  
  
    h = tnodes[1] - tnodes[0]          # Χρονικό βήμα  
    print(f"The maximum norm of the energy error for  
    h = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}") # Εκτύπωση  
print("\nEOC for Energy:")             # Τίτλος EOC  
for i in range(len(N_values) - 1):     # Για κάθε ζεύγος  
    eoc = np.log(errors_energy[i] / errors_energy[i+1])  
    / np.log(2) # Υπολογισμός EOC  
    print(f"EOC from h={N_values[i]} to h={N_values[i+1]}: {eoc:.6f}") # Εκτύπωση  
  
print("\nResults for Angular Momentum Errors:") # Τίτλος  
for i, N in enumerate(N_values):        # Για κάθε N  
    h = (T - t0) / N                    # Χρονικό βήμα  
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error  
    for h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}") # Εκτύπωση
```

Τάξης Σύγκλισης Πεπλεγμένη Μέθοδος του Μέσου

```
def kepler_system(y):                  # Σύστημα Kepler (Hamiltonian)  
    q1, q2, p1, p2 = y                # Ανάθεση μεταβλητών  
    r = np.sqrt(q1**2 + q2**2)         # Απόσταση από το κέντρο  
    dq1dt = p1                        #  $dq/dt = H/p$   
    dq2dt = p2  
    dp1dt = -q1 / r**3                 #  $dp/dt = -H/q$   
    dp2dt = -q2 / r**3  
    return np.array([dq1dt, dq2dt, dp1dt, dp2dt]) # Παράγωγος συστήματος  
  
def energy(q1, q2, p1, p2):            # Συνολική ενέργεια  $H = K + U$   
    return 0.5 * (p1**2 + p2**2) - 1 / np.sqrt(q1**2 + q2**2)
```

Κεφάλαιο 3

```
def angular_momentum(q1, q2, p1, p2):          # Στροφορμή  $L = q \times p$ 
    return q1 * p2 - q2 * p1

t0, T = 0, 100                                # Χρονικά όρια
q01, q02 = 1, 1                               # Αρχική θέση
p01, p02 = 1, 0                               # Αρχική ορμή
y0 = [q01, q02, p01, p02]                    # Αρχική κατάσταση

N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000] # Αριθμοί βημάτων
errors_energy = np.zeros(len(N_values))        # Σφάλματα ενέργειας
errors_momentum = np.zeros(len(N_values))      # Σφάλματα στροφορμής

print("Results for Energy Errors:")
for i, N in enumerate(N_values):               # Για κάθε πλήθος βημάτων
    tnodes, yvals = implicit_midpoint(kepler_system, t0, T, y0, N)
    q1, q2, p1, p2 = yvals[0], yvals[1], yvals[2], yvals[3] # Θέση & ορμή

    energies = energy(q1, q2, p1, p2)          # Ενέργεια στο χρόνο
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2) # Στροφορμή στο χρόνο

    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))

    h = tnodes[1] - tnodes[0]                 # Χρονικό βήμα
    print(f"The maximum norm of the energy error
    for h = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}")

print("\nEOC for Energy:")
for i in range(len(N_values) - 1):             # EOC μεταξύ διαδοχικών N
    eoc = np.log(errors_energy[i] / errors_energy[i+1])
    / np.log(2)
    print(f"EOC from h={N_values[i]} to h={N_values[i+1]}: {eoc:.6f}")

print("\nResults for Angular Momentum Errors:")
for i, N in enumerate(N_values):               # Για κάθε βήμα
    h = (T - t0) / N                           # Τπολογισμός h
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error
    for h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}")
```

Τάξης Σύγκλισης Störmer-Verlet A

```
import numpy as np                            # Εισαγωγή numpy

def f_kepler(q, p): return p                  #  $\dot{q}/dt = p$ 

def g_kepler(q, p):                           #  $\dot{p}/dt = -V$ 
    r = np.sqrt(q[0]**2 + q[1]**2)            # Απόσταση  $r = |q|$ 
    return -q / r**3                          # Ελκτική δύναμη

def energy(q1, q2, p1, p2):                   # Ολική ενέργεια
    return 0.5*(p1**2 + p2**2) - 1/np.sqrt(q1**2 + q2**2)

def angular_momentum(q1, q2, p1, p2):         # Στροφορμή L
    return q1*p2 - q2*p1
```

Κεφάλαιο 3

```
t0, T = 0, 100 # Χρονικό διάστημα
q01, q02 = 1, 1 # Αρχική θέση
p01, p02 = 1, 0 # Αρχική ορμή
y0 = [q01, q02, p01, p02] # Αρχική κατάσταση

N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000] # Πλήθη βημάτων
errors_energy = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα ενέργειας
errors_momentum = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα στροφορμής

print("Results for Energy Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N
    tnodes, yvals = stormer_verlet_A(f_kepler, g_kepler, t0, T, y0, N)
    q1, q2 = yvals[0], yvals[1] # Θέσεις
    p1, p2 = yvals[2], yvals[3] # Ορμές

    energies = energy(q1, q2, p1, p2) # Υπολογισμός ενέργειας
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2) # Υπολογισμός στροφορμής

    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))

    h = tnodes[1] - tnodes[0] # Μέγεθος βήματος
    print(f"The maximum norm of the energy error
    for h = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}")

print("\nEOC for Energy:")
for i in range(len(N_values) - 1): # Υπολογισμός EOC
    eoc = np.log(errors_energy[i]/errors_energy[i+1])
    / np.log(2)
    print(f"EOC from h=1/{N_values[i]} to h=1/{N_values[i+1]}: {eoc:.6f}")

print("\nResults for Angular Momentum Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Σφάλματα στροφορμής
    h = (T - t0) / N
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error
    for h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}")
```

Τάξης Σύγκλισης Störmer-Verlet B

```
def f_kepler(q, p): return p #  $dq/dt = p$ 

def g_kepler(q, p):
    r = np.sqrt(q[0]**2 + q[1]**2) # Απόσταση r
    return -q / r**3 # Δύναμη πεδίου

def energy(q1, q2, p1, p2): # Συνολική ενέργεια
    return 0.5*(p1**2 + p2**2) - 1/np.sqrt(q1**2 + q2**2)

def angular_momentum(q1, q2, p1, p2): # Στροφορμή L
    return q1*p2 - q2*p1

t0, T = 0, 100 # Χρονικό διάστημα
q01, q02 = 1, 1 # Αρχική θέση
```

Κεφάλαιο 3

```

p01, p02 = 1, 0 # Αρχική ορμή
y0 = [q01, q02, p01, p02] # Αρχική κατάσταση

N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, 16000, 32000] # Πλήθος χρονικών βημάτων
errors_energy = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα ενέργειας
errors_momentum = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα στροφορμής

print("Results for Energy Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N
    tnodes, yvals = stormer_verlet_B(f_kepler, g_kepler, t0, T, y0, N)
    q1, q2 = yvals[0], yvals[1] # θέσεις
    p1, p2 = yvals[2], yvals[3] # ορμές

    energies = energy(q1, q2, p1, p2) # Υπολογισμός ενέργειας
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2) # Υπολογισμός στροφορμής

    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))

    h = tnodes[1] - tnodes[0] # Μέγεθος βήματος
    print(f"The maximum norm of the energy error
    for h = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}")

print("\nEOC for Energy:")
for i in range(len(N_values) - 1): # Υπολογισμός EOC
    eoc = np.log(errors_energy[i]/errors_energy[i+1]) / np.log(2)
    print(f"EOC from h={N_values[i]} to h={N_values[i+1]}: {eoc:.6f}")

print("\nResults for Angular Momentum Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N
    h = (T - t0) / N # Υπολογισμός h
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error
    for h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}")

```

Τάξης Σύγκλισης Gauss-Legendre

```

def kepler_system(y): # Σύστημα Kepler (2D Hamiltonian)
    q1, q2, p1, p2 = y # Ανάθεση μεταβλητών κατάστασης
    r = np.sqrt(q1**2 + q2**2) # Απόσταση από το κέντρο
    dq1dt = p1 # H/p1 = p1
    dq2dt = p2 # H/p2 = p2
    dp1dt = -q1 / r**3 # -H/q1 = -q1/|q|^3
    dp2dt = -q2 / r**3 # -H/q2 = -q2/|q|^3
    return np.array([dq1dt, dq2dt, dp1dt, dp2dt]) # Παράγωγοι

def energy(q1, q2, p1, p2): # Ολική ενέργεια H = K + U
    return 0.5*(p1**2 + p2**2) - 1/np.sqrt(q1**2 + q2**2)

def angular_momentum(q1, q2, p1, p2): # Στροφορμή L = q x p
    return q1*p2 - q2*p1

t0, T = 0, 100 # Χρονικό διάστημα [0, 100]
q01, q02 = 1, 1 # Αρχική θέση (1,1)
p01, p02 = 1, 0 # Αρχική ορμή (1,0)

```

Κεφάλαιο 3

```
y0 = [q01, q02, p01, p02] # Διάνυσμα αρχικής κατάστασης

N_values = [1000, 2000, 4000, 8000, # Πλήθος χρονικών βημάτων
            16000, 32000]

errors_energy = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα ενέργειας
errors_momentum = np.zeros(len(N_values)) # Σφάλματα στροφορμής

print("Results for Energy Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Για κάθε N βημάτων
    tnodes, yvals = Gauss_Legendre(kepler_system, t0, T, y0, N)
    q1, q2, p1, p2 = yvals[0], yvals[1], yvals[2], yvals[3]

    energies = energy(q1, q2, p1, p2) # Ενέργεια στο χρόνο
    momenta = angular_momentum(q1, q2, p1, p2)

    errors_energy[i] = np.max(np.abs(energies - energies[0]))
    errors_momentum[i] = np.max(np.abs(momenta - momenta[0]))

    h = tnodes[1] - tnodes[0] # Υπολογισμός του h
    print(f"The maximum norm of the energy error
    for h = {h:.8f} is {errors_energy[i]:.6e}")

print("\nEOC for Energy:")
for i in range(len(N_values) - 1): # Υπολογισμός EOC
    eoc = np.log(errors_energy[i] / errors_energy[i+1])
    / np.log(2)
    print(f"EOC from h={N_values[i]} to h={N_values[i+1]}: {eoc:.6f}")

print("\nResults for Angular Momentum Errors:")
for i, N in enumerate(N_values): # Εμφάνιση σφαλμάτων L
    h = (T - t0) / N
    print(f"The maximum norm of the angular momentum error
    for h = {h:.8f} is {errors_momentum[i]:.6e}")
```

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] AKRIVIS, G. D., AND DOUGALIS, V. A. *Αριθμητικές Μέθοδοι για Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις*, 2nd ed. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2013.
- [2] ARNOLD, V. I. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 2nd ed., vol. 60 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer, 1989.
- [3] ERNST HAIRER, GERHARD WANNER, C. L. *Geometric Numerical Integration*, vol. 31. Springer Nature Link, 2006.
- [4] HAIRER, E., NØRSETT, S. P., AND WANNER, G. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*, vol. 8. Springer-Verlag, 1993.
- [5] HORRES, M. Hamiltonian systems solved by symplectic methods with an extension to stochastic differential equations, February 2022. Supervised by Prof. Dr. Håkon Hoel and Dr. Alexander Litvinenko.
- [6] JERRY B THORNTON, S. T. *Classical Dynamics*, vol. 20. Thomson, 2008.
- [7] LASAGNI, F. M. Canonical Runge–Kutta methods. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)* 39, 6 (1988), 952–953.
- [8] LAURENT-GENGOUX, C., PICHEREAU, A., AND VANHAECKE, P. *Poisson Structures*, vol. 347 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2013.
- [9] MURRAY, J. D. *Mathematical Biology: I. An Introduction*, vol. 17. Springer Science & Business Media, 2007.